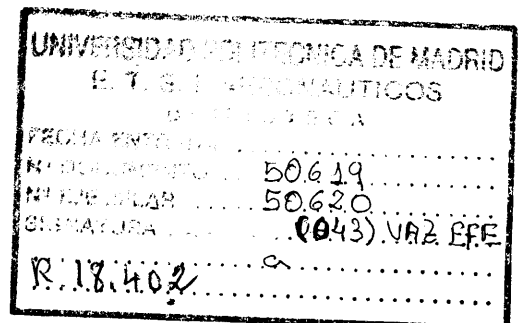


TESIS

EFFECTOS GEOMETRICOS EN LA IGNICION DE SOLIDOS

por:

CARLOS VAZQUEZ ESPI



ESCUELA TECNICA SUPERIOR DE INGENIEROS AERONAUTICOS

Madrid, Junio 1990

Departamento de Motopropulsión y Fluidodinámica
ESCUELA TECNICA SUPERIOR DE INGENIEROS AERONAUTICOS

EFFECTOS GEOMETRICOS
EN LA IGNICION DE SOLIDOS

Autor

Carlos Vázquez Espí
Ingeniero Aeronáutico

Director

Amable Liñán Martínez
Catedrático de Mecánica de Fluidos

Madrid, junio 1990

RESUMEN

Se analiza, mediante técnicas asintóticas basadas en grandes energías de activación, la influencia de los efectos geométricos en la ignición de sólidos producida por un aumento brusco de la temperatura superficial. Las situaciones consideradas corresponden a sólidos cuya superficie es regular, siendo el radio de curvatura comparable al tamaño del sólido, y a sólidos cuya superficie presenta una arista que puede asimilarse a una esquina en un sólido bidimensional. Si el número de Damköhler es suficientemente grande, lo que significa que el tiempo de ignición es pequeño frente al de conducción, el sólido puede considerarse como semiinfinito y el problema de la ignición adquiere carácter universal. Se distinguen dos zonas espaciales, reactiva e inerte, y dos etapas temporales, inicial y de transición. Durante la etapa inicial, la estructura de la zona de reacción está determinada por un problema cuasiestacionario, muy semejante al de Frank-Kamenetskii, en el cual el tiempo desempeña el papel del número de Damköhler. Este problema no admite solución para tiempos mayores que un cierto valor crítico, que corresponde al instante en que la derivada temporal de la temperatura se hace infinita en algún punto. La etapa de transición, que es corta comparada con la inicial, comienza en instantes próximos al crítico cuando no pueden despreciarse los efectos no estacionarios. Su análisis determina el instante de ignición como aquél en que tanto la temperatura como su derivada dejan de estar acotadas. De esta forma se obtiene la corrección por curvatura respecto del caso plano, y el tiempo de ignición correspondiente a la esquina, que es muy pequeño frente al anterior. El análisis de este último caso se generaliza a otros sólidos semiinfinitos cuyas superficies presentan singularidades. A continuación se consideran sólidos finitos, y se muestra como pueden aplicarse los resultados anteriores cuando el número de Damköhler es grande frente a la unidad. En el caso en que éste es de orden unidad se desarrolla una teoría asintótica que divide el proceso en dos etapas: calentamiento inerte e ignición. Finalmente se analiza el efecto del consumo de reactante en los casos planos y de esquina, suponiendo que la cinética química puede modelarse mediante una reacción global del tipo $R \rightarrow P$, y que ésta tiene lugar en fase condensada.

A Marta y a Carletes, de cuya infancia tanto tiempo he dedicado a esta labor.

Muchas personas me han ayudado, de una u otra forma, durante la realización de esta tesis. Creo que todas ellas saben que les estoy muy agradecido, es por esto que no les menciono expresamente, lo que, por otra parte, les resultaría incómodo. Sin embargo quiero dejar constancia de mi gratitud hacia el profesor Amable Liñán cuyas inestimables orientaciones y pacientes explicaciones me han permitido concluir este trabajo y han contribuido decisivamente a mi formación. Igualmente debo reconocer la generosa disposición que en todo momento he encontrado en el profesor José Manuel Vega de Prada, el esmero y paciencia con que Eva Villacieros ha llevado a cabo la transcripción del manuscrito y, en fin, el apoyo recibido por parte de mis compañeros del Departamento de Fundamentos Matemáticos, de cuya actividad no puede desligarse esta tesis.

INDICE

1.- LA TEORIA DE IGNICION	1
1.1 Introducción	1
1.2 Algunos resultados de la teoría de explosiones térmicas	2
1.3 Algunos resultados de la teoría de ignición	9
1.4 Efectos geométricos en la ignición	17
1.5 Orden de magnitud del tiempo de ignición	21
1.6 Objetivos de la tesis	24
2.- EFECTO DE LA CURVATURA EN LA IGNICION DE SOLIDOS	26
2.1 Introducción y formulación	26
2.2 Solución inerte	29
2.3 Zona de reacción	30
2.4 Zona inerte	31
2.5 Solución de la ecuación integral. Etapa inicial	35
2.6 Etapa de transición	36
2.7 Expresión del tiempo de ignición	39
3.- IGNICION EN UNA ESQUINA	41
3.1 Introducción	41
3.2 Formulación y adimensionalización	42
3.3 Solución inerte	44
3.4 Zona de reacción	46
3.4.1 Solución del problema (3.10) para $\tau \ll 1$	48
3.4.2 Solución del problema (3.10) para $\tau = \mathcal{O}(1)$	50
3.4.3 Solución de (3.10) cuando $\xi \gg 1$	52
3.4.4 Solución del problema (3.10) y determinación del valor máximo de τ	57
3.5 Resultados y conclusiones	61
3.6 Figuras	65

APENDICES

3.1 Existencia de solución para el problema (3.10)	71
3.2 Solución del problema lineal (3.11)	75
3.3 Solución del problema exterior (3.30)	80
3.4 Discretización de los operadores de (3.38)	85
3.5 Corrección del tiempo de ignición por efectos no estacionarios	94

4.- GENERALIZACION DE LA IGNICION EN SOLIDOS 101

4.1 Introducción	101
4.2 Ignición en una cuña de ángulo θ_o	102
4.2.1 Formulación y adimensionalización	102
4.2.2 Problema exterior ($\xi \gg 1$)	105
4.2.3 Problema interior ($\xi = \mathcal{O}(1)$)	107
4.2.4 Resultados y conclusiones	108
4.3 Ignición en un cono de semiángulo θ_o ($0 < \theta_o < \pi/2$)	110
4.3.1 Formulación y adimensionalización	110
4.3.2 Problema exterior ($\xi \gg 1$)	112
4.3.3 Problema interior ($\xi = \mathcal{O}(1)$)	114
4.3.4 Resultados y conclusiones	115
4.4 Figuras	117

APENDICES

4.1 Ignición en una esquina tridimensional. Formulación	130
4.2 Solución inerte para el cono	132
4.3 Desarrollo de $f(x)$ en serie del subconjunto de funciones que verifican $P_\nu(y_o) = 0$	136

5.- IGNICION EN SOLIDOS FINITOS 139

5.1 Introducción	139
5.2 Ignición en sólidos rectangulares	141
5.2.1 Formulación y adimensionalización	141
5.2.2 Número de Damköhler $D_a \gg 1$	144
5.2.3 Número de Damköhler $D_a = \mathcal{O}(1)$	147
5.3 Ignición en sólidos cilíndricos y esféricos	149
5.3.1 Formulación y adimensionalización	149
5.3.2 Solución inerte para el cilindro	150

5.3.3 Solución inerte para la esfera	151
5.3.4 Número de Damköhler $D_a \gg 1$	152
5.3.5 Número de Damköhler $D_a = \mathcal{O}(1)$	155
5.4 Resultados y conclusiones	156
5.5 Figuras	158
APENDICES	
5.1 Esquema numérico para los problemas (5.24) y (5.52)	172
6.- EFECTO DEL CONSUMO DE REACTANTE EN LA IGNICION DE SOLIDOS	174
6.1 Introducción	174
6.2 Formulación del modelo unidimensional	177
6.3 Formulación del modelo bidimensional	180
6.4 Análisis de un modelo simplificado	183
6.5 Resolución del caso unidimensional	186
6.5.1 Análisis cuando $\gamma \ll 1$	187
6.5.1.1 Soluciones de la etapa inicial en $1 - \tau \ll 1$	189
6.5.1.2 Solución en la etapa de transición	191
6.5.2 Análisis cuando $\gamma = \mathcal{O}(1)$	194
6.5.2.1 Soluciones de la etapa inicial cuando $\tau_0 - \tau \ll 1$	198
6.5.2.2 Solución en la etapa de transición	202
6.5.3 Análisis cuando $\gamma \gg 1$	206
6.6 Análisis del modelo bidimensional	209
6.7 Resultados y conclusiones	215
6.8 Figuras	218
APENDICES	
6.1 Resolución de la ecuación integral (6.47)	233
6.2 Esquema numérico para la resolución de (6.50)	236
6.3 Solución del problema (6.90)	242
7.- RESUMEN Y FUTURAS PERSPECTIVAS	247
REFERENCIAS	254

CAPITULO 1

LA TEORIA DE IGNICION

1.1 INTRODUCCION

La ignición puede ser considerada como el proceso capaz de poner en marcha el mecanismo mediante el cual un material susceptible de reaccionar de manera exotérmica libera su energía química latente en forma de calor. Esta liberación de energía se realiza inicialmente en una pequeña región del espacio ocupado por el material reactivo, generando posteriormente una onda de combustión (deflagración o detonación) que se propaga a través del mismo.

El estudio de este proceso es de gran interés práctico desde varios puntos de vista que abarcan desde la prevención de explosiones incontroladas en el transporte y almacenamiento de combustibles, hasta la necesidad de iniciar la combustión de forma controlada en motores, hornos, quemadores, etc.

Los métodos para lograr la ignición son muy diversos: contacto del combustible con un cuerpo caliente, o con un alambre calentado eléctricamente, o con gases inertes calientes; hacer incidir una radiación de suficiente potencia; aplicar una pequeña llama piloto; producir una descarga eléctrica (chispa) en el seno del combustible; etc. Todos los métodos citados actúan de una forma común: aumentan la temperatura localmente y aprovechando la fuerte dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura cambian aquella en varios órdenes de magnitud iniciándose la combustión que después se propaga a todo el volumen.

Uno de los métodos más sencillos, al menos desde el punto de vista teórico, para provocar la ignición de un sistema reactivo es aumentar en un tiempo corto comparado con el de conducción la temperatura ambiente del medio en que se encuentra y,

por tanto, su temperatura superficial. Esto puede hacerse poniéndolo en contacto con una superficie caliente o sumergiéndolo en el seno de un fluido inerte a alta temperatura. Este problema fue analizado inicialmente por Zeldovich [ZE1], quien aprovechó la teoría de explosiones térmicas desarrollada por Frank-Kamenetskii. A continuación exponemos los resultados principales de la teoría de explosiones térmicas y de ignición con el fin de introducir algunos de los métodos e ideas que serán usados posteriormente. El desarrollo que sigue está inspirado en el que se realiza en los textos clásicos de Frank-Kamenetskii [FK] y Zeldovich *et al.* [ZE], completado en algunos aspectos con el "review" de Merzhanov y Averson [MA].

1.2 ALGUNOS RESULTADOS DE LA TEORIA DE EXPLOSIONES TERMICAS

La teoría de explosiones térmicas fué desarrollada inicialmente por Semenov [SE] y Frank-Kamenetskii [FK1]. En ambos el fenómeno de explosión térmica, que físicamente implica que la reacción química tiene lugar a gran intensidad simultáneamente en todo el sistema, está asociado, desde el punto de vista matemático, con la imposibilidad de existencia de soluciones estacionarias de la ecuación que describe la evolución de la temperatura en las que se equilibre la producción y eliminación de calor.

En el modelo formulado por Semenov la hipótesis principal es que el aumento de temperatura debido a la reacción química se produce de manera homogénea en todo el medio reactante, es decir, la temperatura es constante espacialmente y sólo depende del tiempo. El mecanismo de eliminación del calor generado es la conducción a través de las paredes hacia el medio exterior, cuya capacidad calorífica se supone mucho mayor que la de la mezcla reactiva y, por tanto, mantiene su temperatura constante. La variación temporal de la temperatura está determinada por la compensación o no entre la producción y eliminación de calor, cuya formulación matemática es:

$$\frac{dT}{dt} = W(T) - \alpha \frac{S}{V}(T - T_o) \quad (1.1)$$

donde T_o es la temperatura del medio ambiente, α es el coeficiente de transferencia de calor, S y V son la superficie y el volumen del recipiente y $W(T)$ representa el término de producción de calor. Mediante el conocido diagrama de Semenov pueden ilustrarse los resultados de esta teoría: los puntos de intersección entre $W(T)$ (que generalmente es una función creciente y convexa de T) y las rectas $(\alpha S/V)(T - T_o)$ determinan las

soluciones estacionarias. Cuando la pendiente $\alpha S/V$, que representa la conductividad, es suficientemente grande existen dos soluciones estacionarias. Como puede deducirse fácilmente del diagrama la correspondiente a temperaturas bajas T_l es estable, mientras que la correspondiente a T_u es inestable. Si la pendiente es menor que la correspondiente a la recta tangente a $W(T)$ desde el punto $(T_o, 0)$ no hay soluciones estacionarias, y por ser $W(T)$ convexa el signo de dT/dt es siempre positivo, lo que conduce a un aumento muy brusco de la temperatura ("thermal runaway") que solamente está limitado por el consumo de combustible y que tiene lugar en tiempos muy cortos comparados con el transcurrido desde que el sistema se encontraba a la temperatura inicial. De hecho puede considerarse que se produce de forma instantánea al cabo de un tiempo denominado tiempo de explosión o período de inducción. El valor crítico de la conductividad que determina la no existencia de soluciones estacionarias es, evidentemente, igual a la pendiente de la recta tangente a $W(T)$.

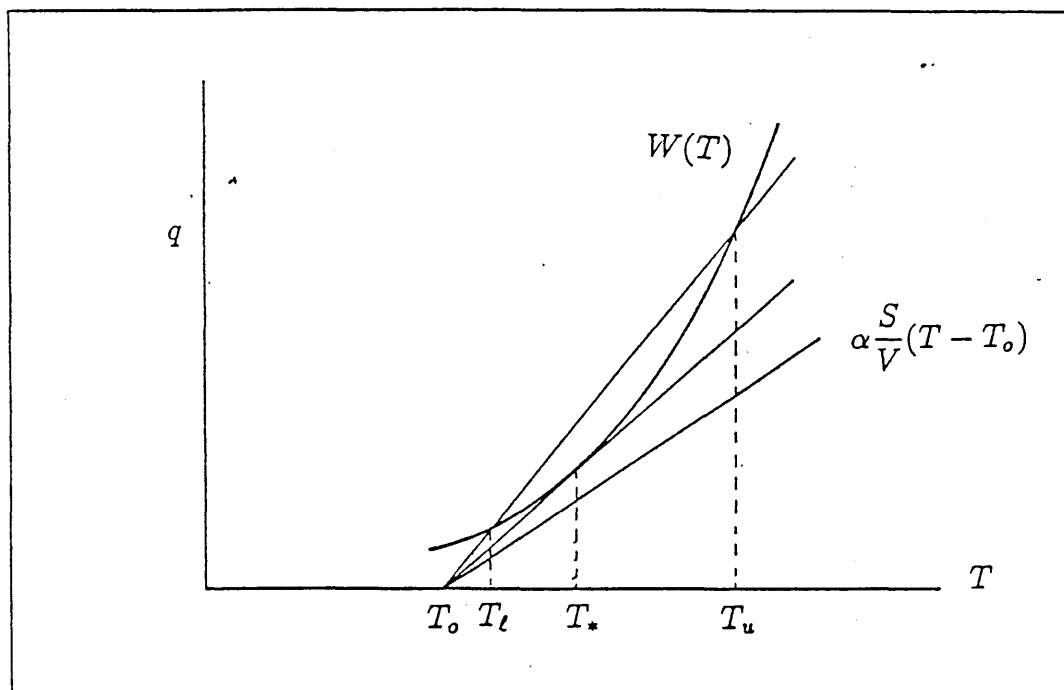


Figura 1.1 Diagrama de Semenov.

Esta teoría es correcta desde un punto de vista cualitativo pero no cuantitativo, ya que la hipótesis de distribución de temperatura homogénea es muy difícil de verificar (para el caso de sólidos es generalmente inaceptable y para los líquidos o gases requiere una intensa convección forzada o natural). Además, la condición crítica para la explosión térmica dependería básicamente del espesor y material de la pared del recipiente, lo que no concuerda con los experimentos [FK, p.374].

La teoría de Frank-Kamenetskii está basada en las siguientes hipótesis: a) la mezcla reactiva se encuentra en reposo, b) la transmisión de calor se realiza por conducción a través de la mezcla, c) la reacción química tiene lugar de manera no homogénea y d) la temperatura de la pared permanece constante e igual a la temperatura inicial. Si suponemos que la densidad ρ , el calor específico c_p y la conductividad térmica λ son constantes, la ecuación de la energía que tiene en cuenta las anteriores hipótesis es:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + W(T) \quad (1.2)$$

que debe completarse con la condición inicial $T = T_0$ y con la condición de contorno $T = T_0$ en la frontera.

El término $W(T)$ representa la cantidad de calor liberada por la reacción química. Por simplicidad supondremos que ésta puede modelarse mediante una reacción global tipo Arrhenius. Si el calor de reacción q es muy grande es posible despreciar, en primera aproximación, el consumo del reactante, cuyo efecto aparecería como una pequeña corrección. Por tanto el término de reacción puede representarse mediante:

$$W(T) = \rho q B' T^m \exp(-E'/RT) \quad (1.3)$$

donde q , B' (factor preexponencial), E' (energía de activación) y m ($-1 < m < 2$) son constantes.

En todos los procesos de combustión la energía de activación E' es muy grande (del orden de 10^4 a 10^5 cal/mol) lo que hace que la velocidad de reacción sea muy pequeña a temperaturas próximas a la ambiente y que sea fuertemente no lineal. En consecuencia pequeños cambios en la temperatura pueden originar variaciones importantes en la velocidad de reacción. Este hecho justifica la denominada transformación de Frank-Kamenetskii, que consiste en linealizar el exponente del factor exponencial respecto a una temperatura característica T_c , que depende de cada problema, de forma que el factor exponencial en la expresión de Arrhenius puede escribirse como:

$$\exp\left(-\frac{E'}{RT}\right) \simeq \exp\left(-\frac{E'}{RT_c}\right) \exp\left(-\frac{E'}{RT_c^2}(T - T_c)\right) \quad (1.4)$$

que es válido siempre que $RT_c/E' \ll 1$, y para incrementos de temperatura relativos a T_c del orden de RT_c/E' que originan cambios en la velocidad de reacción del orden de e .

Para los valores de T situados en un entorno de centro T_c y radio $RT_c^2/E' \ll 1$ el factor T^m puede aproximarse por:

$$T^m \simeq (T_c e)^m \exp(-mRT_c/T) \quad (1.5)$$

de manera que

$$B'T^m \exp(-E'/RT) \simeq B \exp(-E/RT) \quad (1.6)$$

siendo $B = B'(T_c e)^m$ y $E = E' + mRT_c$. Cuando se introducen estas dos aproximaciones en la ecuación de la energía, con T_o como temperatura característica, se obtiene:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \Delta T + \frac{qB}{c_p} e^{-E/RT_o} \exp\left(\frac{E}{RT_o^2}(T - T_o)\right) \quad (1.7)$$

siendo $\alpha = \lambda/\rho c_p$ el coeficiente de difusividad térmica. Si tomamos como variable para la temperatura $\theta = (E/RT_o^2)(T - T_o)$ y adimensionalizamos con la longitud característica del sólido, ℓ , la ecuación anterior es:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{1}{t_\alpha} \Delta \theta + \frac{1}{t_q} e^\theta \quad (1.8)$$

donde

$$t_\alpha = \frac{\ell^2}{\alpha}; \quad t_q = \frac{c_p RT_o^2 e^{E/RT_o}}{qBE} \quad (1.9)$$

son los tiempos característicos asociados a la conducción de calor y reacción química, respectivamente. Adimensionalizando el tiempo con t_α y llamando $\tau = t/t_\alpha$, el problema puede formularse como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \Delta \theta + D_a e^\theta \quad \text{en } \Omega \quad (1.10a)$$

$$\theta(\tau = 0) = 0 \quad \text{en } \Omega; \quad \theta(\tau > 0) = 0 \quad \text{en } \partial\Omega \quad (1.10b)$$

siendo Ω el dominio acotado por el sólido y $\partial\Omega$ la frontera del mismo que se supone suficientemente lisa. Debido a la transformación de Frank-Kamenetskii el único parámetro que aparece en el problema es D_a , número de Damköhler, que, en este caso, se define como el cociente entre el tiempo de conducción y el químico:

$$D_a = \frac{t_\alpha}{t_q} = \frac{\ell^2 q B E e^{-E/RT_o}}{\alpha c_p R T_o^2} \quad (1.11)$$

y que representa la influencia de todos los parámetros físico-químicos que intervienen en el problema.

Físicamente la existencia de soluciones estacionarias del problema (1.10) está ligada a la posibilidad de compensar el calor generado por la reacción química con la pérdida de calor desde la mezcla reactiva hacia el exterior. En condiciones casi adiabáticas no es posible eliminar por conducción hacia el exterior todo el calor producido. Por tanto si $D_a \gg 1$, ($\ell \gg 1$ ó $\alpha \ll 1$) no existirán soluciones estacionarias. En cambio si $D_a \ll 1$ las condiciones son favorables para la evacuación de calor pudiéndose establecer el balance que conduzca a dicha solución. Es decir, es razonable esperar que el problema

$$\Delta\theta + D_a e^\theta = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (1.12a)$$

$$\theta = 0 \quad \text{en } \partial\Omega \quad (1.12b)$$

carezca de solución para valores de D_a suficientemente grandes que dependen de Ω .

Los modelos formulados por Semenov y Frank-Kamenetskii pueden considerarse como límites de un modelo más general en el cual la condición de contorno en la superficie del sólido expresa la conservación del flujo de calor a través de la misma. Si suponemos que este flujo obedece a leyes newtonianas la condición de contorno es:

$$-\frac{\partial\theta}{\partial n} = N_u \theta_s,$$

siendo $N_u = h\ell/\lambda$ el número de Nusselt, θ_s la temperatura adimensional en la superficie de la partícula (que es una incógnita del problema) y $\partial/\partial n$ la derivada en la dirección de la normal exterior. Cuando $N_u \ll 1$ la conductividad es muy grande de forma que la temperatura en el interior del sólido es prácticamente uniforme, obteniéndose en el límite $N_u \rightarrow 0$ el modelo de Semenov. Por el contrario si $N_u \gg 1$ la conducción de calor a través de la superficie es muy efectiva siendo la diferencia entre la temperatura superficial y la ambiente muy pequeña, y en el límite $N_u \rightarrow \infty$ ambas son iguales, con lo cual la condición de contorno es de tipo Dirichlet que es una de las hipótesis del modelo de Frank-Kamenetskii.

El problema (1.12), denominado de Frank-Kamenetskii, y el problema de evolución asociado (1.10) han recibido una notable atención en la literatura. Fujita [FU] ha demostrado que para cualquier dominio acotado existe siempre un valor crítico del número de Damköhler, $D_{a,*}$, tal que si $D_a < D_{a,*}$ el problema (1.12) admite solución, mientras que si $D_a > D_{a,*}$ carece de ella. Además demuestra que si $D_a > D_{a,*}$ la solución de (1.10) explota en un tiempo finito o infinito y por consiguiente es siempre

inestable, en cambio si $D_a < D_{a,*}$ la estabilidad de la solución depende de la condición inicial. Bebernes y Kassoy [BK] demuestran un resultado similar al de Fujita y determinan a partir del problema de evolución un valor crítico de D_a , ligeramente superior al clásico que se obtiene mediante el problema de Frank-Kamenetskii, para el cual la solución de (1.10) explota en un tiempo finito del que calculan cotas superior e inferior. Mignot *et al.* [MMP] han obtenido una expresión que permite calcular la derivada del valor crítico $D_{a,*}$ respecto del dominio Ω .

El valor crítico $D_{a,*}$ depende por consiguiente de Ω y su determinación debe hacerse en general de forma numérica, lo que conduce a un problema cuyo grado de complejidad está ligado al tipo de dominio que se considere. Frank-Kamenetskii [FK] determinó de forma analítica el valor crítico en los casos plano y cilíndrico y de forma numérica el caso esférico, obteniendo, respectivamente, 0.88, 2 y 3.32. Dió, además, fórmulas aproximadas para cuerpos sencillos, y mostró que si $D_a < D_{a,*}$ en el caso plano y cilíndrico hay dos soluciones estacionarias: la correspondiente a bajas temperaturas es estable mientras que la de altas es inestable. Zeldovich *et al.* [ZE, pp.147-161] resuelven el problema de Frank-Kamenetskii haciendo uso de la invariancia respecto de un grupo de transformaciones. Determinan los mismos valores de $D_{a,*}$ y encuentran que en el caso esférico el número de soluciones estacionarias varía desde uno a infinito dependiendo del intervalo de valores de D_a que se consideren (esto es debido a que la ecuación posee dos puntos singulares, uno de los cuales es un foco). Wake y Rayner [WR] han desarrollado un método basado en técnicas variacionales para determinar una cota superior del valor de $D_{a,*}$ correspondiente a un dominio arbitrario.

El valor crítico del número de Damköhler determinado mediante el problema (1.12) es en realidad el primer término del desarrollo en potencias del parámetro pequeño RT_o/E , lo que ha dado lugar a numerosos trabajos que tratan de determinar la dependencia de $D_{a,*}$ con la energía de activación. Shouman *et al.* [SDT] resuelven numéricamente el problema correspondiente al "slab" sin hacer uso de la transformación de Frank-Kamenetskii y obtienen que el valor clásico 0.88, correspondiente a energía de activación infinita, es una cota inferior del valor que se obtiene con energía de activación finita. Encuentran además que para $RT_o/E \simeq .245$ desaparece la criticalidad. Shouman y Donaldson [SD] resuelven el problema anterior desarrollando la temperatura en serie de potencias de la variable espacial y determinan $D_{a,*}$ para el slab, el cilindro y la esfera considerando E finita. Bazley y Wake [BW] emplean una transformación del término de

Arrhenius sugerida por Takeno [TA] y calculan $D_{a,*}$ para el slab en función de RT_o/E , obteniendo también que para valores de este parámetro superiores a .25 desaparece la criticalidad. Vega y Liñán [VL] emplean técnicas asintóticas para calcular términos de orden superior del desarrollo de $D_{a,*}$ en potencias de $1/E$ obteniendo resultados que concuerdan con los numéricos.

La teoría estacionaria de Frank-Kamenetskii permite determinar el valor del número de Damköhler que separa los regímenes supercríticos, en los que se produce la explosión térmica, de los subcríticos en los que la temperatura evoluciona gradualmente hasta alcanzar una distribución estacionaria que también puede calcularse. La descripción de procesos tales como el período transitorio en los regímenes subcríticos, los períodos de inducción y explosión en los supercríticos o, simplemente, el efecto del consumo del reactante no puede, evidentemente, realizarse mediante esta teoría.

El análisis de las teorías no estacionarias, que incluyen las derivadas temporales, ha sido simplificado, sin que los problemas resultantes sean triviales, mediante el empleo de técnicas asintóticas basadas en considerar altas energías de activación que además hacen posible identificar las diferentes etapas de que consta el proceso global. Una simplificación adicional consiste en despreciar las variaciones espaciales y considerar las explosiones térmicas en sistemas homogéneos. Hermance [HE] realiza el análisis de la explosión térmica en un sistema homogéneo y adiabático, en el que incluye el consumo de reactante, utilizando métodos de perturbaciones basados en desarrollar θ y τ en términos de una nueva variable temporal y un parámetro pequeño relacionado con el inverso de la energía de activación. Kassoy [KS1, KS2] generaliza los resultados de Hermance y determina las escalas temporales que intervienen en las distintas fases de la evolución del sistema desde el instante inicial hasta el momento en que se consume todo el reactante. Posteriormente en [KS3] realiza un análisis similar incluyendo la pérdida de calor a través de la frontera del sistema y considerando valores del parámetro asociado, a , menores que el crítico, e , de manera que el sistema es supercrítico. Kassoy y Liñán [KL] realizan un detallado estudio de la solución del problema anterior cuando $a = e + \Delta$ ($\Delta \ll 1$) y demuestran la existencia de dos regímenes uno de ignición y otro de extinción, dependiendo el valor crítico de Δ del orden de la reacción y del calor de reacción del combustible. Encuentran además que en los sistemas supercríticos pero tales que las pérdidas de calor, representadas por Δ , son casi críticas la explosión térmica se produce después de un período de tiempo muy largo durante el cual la tempe-

ratura ha estado aumentando muy lentamente. Las ideas desarrolladas en estos trabajos fueron empleadas por Kassoy y Poland [KP1, KP2] para abordar el problema de la explosión térmica en un sistema no homogéneo, analizando el período de inducción, que finaliza con la aparición de un "hot-spot" en una región bien definida fuera de la cual la temperatura es muy próxima a la inicial, y el período de explosión que corresponde al desarrollo del "hot-spot" durante el cual aumenta la temperatura local hasta valores próximos a la adiabática y se consume una cantidad importante de reactante. Kapila [KA1] realiza un análisis similar de esos dos períodos y además analiza las etapas posteriores consistentes en la formación y propagación de una llama a través del medio reactivo.

1.3 ALGUNOS RESULTADOS DE LA TEORIA DE IGNICION

Mientras en la teoría de explosiones térmicas se estudia la evolución de un sistema reactivo que en el instante inicial se encuentra a una temperatura uniforme igual a la ambiente, en la teoría de ignición se considera un sistema que inicialmente se encuentra en un estado muy subcrítico, de manera que la reacción es despreciable y por tanto puede mantenerse en ese estado indefinidamente, y al que mediante una fuente exterior se le comunica una cierta cantidad de energía que, bajo ciertas condiciones, puede activar la reacción química, dando lugar a que se desarrolle un proceso de combustión autosostenido en el sentido de que llega a ser independiente del aporte de energía exterior, es decir, si una vez iniciada la combustión cesa aquél, ésta es capaz de proseguir. Desde el punto de vista matemático esto se traduce en unas condiciones iniciales o de contorno especiales para la ecuación de conservación de la energía. Esta situación es más realista que la correspondiente a las explosiones térmicas pues el almacenamiento de un sistema reactivo requiere mantenerlo en un estado muy subcrítico siendo difícil situarlo en uno supercrítico, cuya temperatura sea uniforme, sin que previamente se haya producido la ignición.

Los modos de excitar el sistema que han recibido mayor atención desde el punto de vista teórico consisten en aplicar un flujo de calor en la superficie o en aumentar la temperatura de la misma. En ambos casos tienen lugar dos tipos de fenómenos diferentes pero interrelacionados entre sí. Por una parte la conducción de calor no estacionaria hacia el interior del sólido tiende a elevar la temperatura del mismo y por otra comienza, si la temperatura es suficientemente alta, una reacción química en una

capa delgada próxima a la superficie. Una fracción del calor liberado se transmitirá por conducción mientras que la restante elevará la temperatura de la zona de reacción activando ésta. La relación entre estos dos efectos determinará que se verifiquen o no las condiciones para la formación de un "hot-spot" y de la posterior onda de combustión que se propague a todo el sólido.

Zeldovich [ZE1] fué el primero en formular una teoría de la ignición. Extendió las ideas de la teoría de explosiones térmicas para considerar la ignición como el régimen en que no es posible encontrar soluciones estacionarias en las que la reacción química esté confinada en una región delgada próxima a la superficie y la velocidad de reacción sea tal que todo el calor producido pueda ser transmitido por conducción. En definitiva entendió la ignición como una explosión térmica local. Mediante este modelo, que constituye una teoría estacionaria de la ignición, analizó un "slab" cuyas paredes están situadas a diferentes temperaturas, de manera que la temperatura en la pared caliente sea mucho mayor que en la fría. La velocidad de reacción cerca de ésta es despreciable y por tanto puede ignorarse el efecto de la reacción química. Es decir, la región próxima a la pared fría puede considerarse como inerte y sirve únicamente para eliminar parte del calor generado cerca de la pared caliente y químicamente activa. Cuando el "slab" es muy ancho los gradientes de temperatura en la zona inerte son pequeños, con lo cual las pérdidas de calor desde la zona de reacción son reducidas y se dan las condiciones para una explosión térmica local. Podemos, pues, dividir el sólido en dos regiones: una interior delgada y reactiva, y otra exterior ancha e inerte. Al resolver la ecuación de la temperatura, sin la derivada temporal, se localizan las soluciones estacionarias en cada una de las regiones. Si es posible verificar la condición de acoplamiento entre ambas existe solución estacionaria global y no tiene lugar la ignición.

Suponiendo que la energía de activación es grande, al realizar en (1.2) la transformación de Frank-Kamenetskii, tomando como temperatura de referencia la de la superficie T_s y con las variables $\theta = E(T - T_s)/RT_s^2$ y $\xi = x/\ell$, las soluciones estacionarias de la ecuación de conducción del calor se obtienen resolviendo el problema:

$$\frac{d^2\theta}{d\xi^2} + D_{a,s}e^\theta = 0 \quad (1.13a)$$

$$\theta(0) = 0, \quad \theta(1) = -\beta \quad (1.13b)$$

donde $D_{a,s}$ es el número de Damköhler definido en (1.11) pero calculado a la temperatura T_s y $\beta = E(T_s - T_o)/RT_s^2$ es el número de Zeldovich, cuya hipótesis consiste en suponer

$\beta \gg 1$. Como consecuencia de ésta y de las condiciones de contorno (1.13b) la reacción está congelada cerca de la pared fría mientras que cerca de la pared caliente el término e^θ es de orden unidad. El valor típico del gradiente de temperatura es $\theta_\xi = -\beta$ lo que indica que la reacción se congela a distancias de orden unidad de $\xi = 0$. Podemos por tanto identificar dos regiones: una región de conducción inerte correspondiente a $\xi = \mathcal{O}(1)$ donde la reacción está congelada y una zona de reacción delgada situada en torno a $\xi = 0$ y cuyo espesor es de orden $1/\beta$ que puede analizarse como una capa límite. Si en ésta última tomamos como variable espacial $\eta = \beta\xi$ las ecuaciones y condiciones de contorno para ambas regiones son:

$$\text{zona de reacción:} \quad \frac{d^2\theta}{d\eta^2} + \tilde{D}_a e^\theta = 0, \quad \theta(\eta = 0) = 0 \quad (1.14)$$

$$\text{zona inerte:} \quad \frac{d^2\theta}{d\xi^2} = 0, \quad \theta(\xi = 1) = -\beta \quad (1.15)$$

siendo $\tilde{D}_a = D_{a,s}/\beta^2$ un número de Damköhler modificado de orden unidad. En la región intermedia entre ambas debe verificarse la condición de acóplamiento que representa la igualdad del flujo de calor:

$$-\left. \frac{d\theta}{d\eta} \right|_{\eta=\infty} = -\frac{1}{\beta} \left. \frac{d\theta}{d\xi} \right|_{\xi=0} \quad (1.16)$$

De la ecuación para la zona inerte obtenemos que el flujo de calor en la misma es constante y puede tomarse, en primera aproximación, igual al de la solución inerte, al ser ésta $\theta_i = -\beta\xi$ se obtiene $d\theta/d\xi = -\beta$. Por consiguiente el problema para la zona de reacción es:

$$\frac{d^2\theta}{d\eta^2} + \tilde{D}_a e^\theta = 0, \quad \theta(\eta = 0) = 0, \quad -\left. \frac{d\theta}{d\eta} \right|_{\eta=\infty} = 1 \quad (1.17)$$

El único parámetro que interviene en el problema es \tilde{D}_a . Análogamente a lo que ocurría en las explosiones térmicas, cuando éste es pequeño el calor generado por la reacción es también pequeño y puede eliminarse por conducción a través de la zona inerte, existiendo solución estacionaria. Sin embargo si \tilde{D}_a es grande el flujo de calor en $\eta \rightarrow \infty$ no es suficiente para evacuar todo el calor producido, lo que origina un aumento de temperatura no estacionario en la zona de reacción, que finalmente da lugar a la ignición. Para calcular el valor crítico de \tilde{D}_a determinamos una integral primera de (1.17) multiplicando por $d\theta/d\eta$ e integrando una vez con las condiciones de contorno en $\eta \rightarrow \infty$, obteniéndose:

$$\left(\frac{d\theta}{d\eta} \right)^2 - 1 + 2\tilde{D}_a e^\theta = 0 \quad (1.18)$$

En el origen $(d\theta/d\eta)^2 = 1 - 2\tilde{D}_a \geq 0$, de manera que la condición para la existencia de soluciones estacionarias es $\tilde{D}_a \leq 1/2$, mientras que si $\tilde{D}_a > 1/2$ se produce la ignición. Al escribir esta condición en variables físicas obtenemos la relación entre los distintos parámetros que debe verificarse para la existencia de ignición:

$$\sqrt{2 \frac{RT_s^2}{E} \frac{\rho q B e^{-E/RT_s}}{\lambda}} > q' \quad (1.19)$$

donde $q' = (T_s - T_o)/\ell$ es el flujo de calor determinado por la solución inerte. El análisis anterior muestra que la distribución de temperatura correspondiente a las condiciones críticas tiene derivada nula en la pared, con lo cual no hay flujo de calor hacia el interior.

El problema anterior puede considerarse como una teoría estacionaria de la ignición, en la cual se supone que es posible establecer una distribución de temperatura estacionaria tanto en la zona de reacción como en la inerte. La ignición está asociada a la imposibilidad de acoplar ambas soluciones.

Puede elaborarse una teoría no estacionaria si en la ecuación de la temperatura retenemos la derivada temporal. Efectuando hipótesis análogas respecto del término de reacción a las ya señaladas, la formulación matemática sería:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \Delta T + \rho q B e^{E/RT} \quad \text{en } \Omega \quad (1.20)$$

que junto con la condición inicial, $T = T_o$ en Ω , y de contorno, $T = T_s$ en $\partial\Omega$, constituye un problema de Cauchy que determina la evolución de la temperatura en cada punto de Ω , y cuya solución debe obtenerse numéricamente. El caso cilíndrico ha sido resuelto por Merzhanov *et al.* [MAG] quienes han obtenido información cualitativa que puede trasladarse a situaciones más generales. Sin embargo esto puede hacerse analizando los órdenes de magnitud de los términos que intervienen en (1.20). Mediante los tiempos característicos definidos en (1.8), con t_q calculado a la temperatura T_s , (1.20) puede escribirse en la forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \Delta \theta + D_a e^\theta \quad (1.21a)$$

$$\theta(\tau = 0) = -\theta_o \quad \text{en } \Omega, \quad \theta(\tau > 0) = 0 \quad \text{en } \partial\Omega \quad (1.21b)$$

donde D_a es de nuevo el número de Damköhler:

$$D_a = \frac{t_\alpha}{t_q} = \frac{\ell^2 q B E e^{-E/RT_s}}{\alpha c_p R T_s^2} \quad (1.23)$$

Si $t_\alpha \ll t_q$, $D_a \ll 1$ y el término de reacción puede despreciarse, de manera que, en primera aproximación, el material se comporta como inerte alcanzándose una distribución estacionaria que si $D_a \ll 1$ puede expresarse mediante un desarrollo en potencias de D_a . Mientras D_a sea menor que el valor $D_{a,*}$ (de orden unidad) correspondiente a la explosión térmica, es decir, mientras el sistema sea subcrítico, existe una distribución estacionaria, más parecida a la inerte ($D_a = 0$) cuanto más pequeño sea D_a .

Si $D_a > D_{a,*}$ pero de orden unidad no se alcanza solución estacionaria pues el sistema es supercrítico, pero como $t_\alpha \sim t_q$ la reacción química tiene lugar cuando la conducción de calor ha elevado la temperatura en todos los puntos del sólido a valores próximos a T_s . En consecuencia la reacción química inducida por el aumento de temperatura en el contorno tiene lugar casi simultáneamente en todo el sistema produciéndose una explosión térmica. Este régimen suele ser denominado de auto-ignición.

Cuando el sistema es supercrítico y $D_a \gg 1$, es $t_\alpha \gg t_q$ y, por tanto, el calor que llega desde el exterior no tiene tiempo de difundirse a través del volumen antes de que se inicie la reacción en las capas próximas a la superficie que son las más calientes. Una vez producida la ignición el calor liberado calienta capas más interiores y a ellas se propaga la reacción cuando se agota el combustible en las primeras. De este manera se origina la onda de combustión que se propaga hacia el interior donde encuentra que la temperatura sigue siendo del orden de T_o .

Entre el régimen estacionario y el de autoignición existe un límite bien definido: el valor crítico del número de Damköhler. Esto no ocurre entre el régimen de autoignición y el de ignición, entre los cuales existe una zona de transición, más o menos amplia, situada entre $D_a = O(1)$ y $D_a \gg 1$.

En el trabajo, ya citado, de Merzhanov [MAG] se resolvió el caso cilíndrico para radios superiores al crítico. Encontraron que cuando el sólido era muy ligeramente supercrítico el valor máximo de la temperatura tenía lugar en el eje del cilindro, pero si se aumentaba el radio del cilindro el máximo ocurría inicialmente en un punto no situado en el eje, desplazándose hacia éste en forma de onda a medida que transcurría el tiempo. Si el radio era ligeramente superior al crítico la onda era capaz de alcanzar el eje donde posteriormente se producía la explosión térmica. Para valores del radio moderadamente supercríticos la explosión térmica ocurría en un punto intermedio entre el eje y la superficie, antes de que la onda hubiese llegado al mismo. Cuanto mayor era

el radio más acusado era este efecto. Este régimen corresponde a la transición antes citada. Si el radio es muy superior al crítico la región donde se produce el máximo, y en la cual la temperatura se ha elevado de forma notable por encima de la inicial, es muy estrecha y está situada muy cerca de la superficie. Esto indica que ha aparecido una zona de reacción bien definida pero que constituye una capa límite, lo que dificulta el cálculo numérico si éste se realiza sin el empleo de técnicas especiales previas. Además, como veremos a continuación, los casos de interés práctico corresponden al régimen de ignición y no a la transición entre éste y el de autoignición.

El número de Damköhler que hemos definido como el cociente entre los tiempos característicos asociados a la reacción química y a la conducción de calor puede también definirse, mediante una reagrupación adecuada, como

$$D_a = \left(\frac{\ell}{\ell_r} \right)^2 = \frac{\ell^2}{\alpha c_p R T_s^2 e^{E/RT_s} / q B E} \quad (1.23)$$

siendo ℓ la longitud característica del sólido y ℓ_r el espesor de la zona de reacción a la temperatura T_s definido mediante:

$$\ell_r = \sqrt{\frac{\lambda R T_s^2}{\ell^2 \rho q B E e^{-E/RT_s}}} \quad (1.24)$$

Esta nueva definición permite interpretar los resultados anteriores de la siguiente manera. Si $D_a = \mathcal{O}(1)$ ambas longitudes son parecidas y tiene lugar la explosión térmica pues la reacción se produce en todo el sólido. Por el contrario si $D_a \gg 1$ la zona de reacción es muy delgada frente al tamaño del sólido de manera que la reacción sólo tiene lugar en una capa superficial originando la ignición.

Al intentar producir la ignición mediante un aumento de la temperatura superficial surge la cuestión de cuál es la temperatura T_s capaz de producir aquélla. Supongamos que el sólido se encuentra inicialmente a la temperatura T_o que corresponde a un estado subcrítico. Para un valor dado de las constantes ℓ , λ , q , B y E sea T_* el valor de la temperatura para la cual el número de Damköhler alcanza su valor crítico $D_{a,*}$. Si manteniendo invariables ℓ , λ , q , B y E elevamos la temperatura superficial con el objeto de producir la ignición deberemos alcanzar una temperatura T_s mayor que T_* y tal que el valor de D_a correspondiente, $D_{a,s}$, verifique $D_{a,s} \gg 1$. Como, por otra parte, $D_{a,*} = \mathcal{O}(1)$ también se cumple $D_{a,s} \gg D_{a,*}$. A partir de la definición del número de Damköhler la relación $D_{a,s}/D_{a,*}$ puede escribirse en la forma:

$$\frac{D_{a,s}}{D_{a,*}} = \left(\frac{T_*}{T_s} \right)^2 \exp \left(\frac{E}{R T_s} \frac{T_s/T_* - 1}{T_s/T_*} \right) \quad (1.25)$$

Bajo la hipótesis de energía de activación grande ($E/RT_* \gg 1$) para que $D_{a,s}/D_{a,*} \gg 1$ es suficiente con que el incremento de temperatura relativo a la temperatura crítica sea moderadamente grande respecto al inverso de la energía de activación. En efecto, sea

$$\frac{T_s}{T_*} - 1 = \gamma(RT_*/E) \quad (1.26)$$

siendo γ un número positivo de orden unidad. En estas condiciones como $T_s/T_* = \mathcal{O}(1)$ el cociente $D_{a,s}/D_{a,*}$ es

$$\frac{D_{a,s}}{D_{a,*}} \simeq e^\gamma \quad (1.27)$$

de manera que basta un incremento relativo de temperatura de γ veces la temperatura de Frank-Kamenetskii para cambiar el número de Damköhler en un factor de e^γ . Esto es consecuencia de la gran sensibilidad respecto de la temperatura de las reacciones químicas cuya energía de activación es muy alta. Por tanto los incrementos de temperatura necesarios para provocar la ignición son pequeños lo que hace, por otra parte, que el régimen de autoignición corresponda a un reducido intervalo de temperaturas pues para que fuese $D_{a,s} > D_{a,*}$ con $D_{a,s}/D_{a,*} = \mathcal{O}(1)$ debería ser $\gamma \lesssim 1$ lo que implica incrementos de temperatura respecto de la crítica muy pequeños, que son difíciles de conseguir desde un punto de vista práctico. Si se quiere disponer de un sólido ligeramente supercrítico hay que recurrir a modificar otros parámetros, por ejemplo la longitud característica que es la estrategia adoptada en el trabajo de Merzhanov.

Un estudio similar a [MAG] para el caso de sólidos muy supercríticos, en los que la ignición tiene lugar muy cerca de la pared, e incluyendo el efecto del consumo de reactante fué realizado por Averson *et al.* [ABM]. Mediante la integración numérica de las ecuaciones de conservación de la energía y de la fracción másica del reactante demostraron que cuando el calor de reacción es muy grande el consumo de combustible no afecta de modo significativo al proceso, pero cuando éste es pequeño la ignición llega a desaparecer manteniéndose la reacción, y por consiguiente el consumo de reactante, gracias a la fuente de energía exterior que en ese trabajo adoptaba la forma de un aumento de temperatura superficial.

También en el análisis de la ignición el empleo de técnicas asintóticas basadas en la hipótesis de grandes energías de activación ha contribuido a hacer posible un tratamiento sistemático de este problema. Liñán y Williams [LW1] estudian el proceso de ignición de un sólido semiinfinito cuando el estímulo exterior consiste en radiar la superficie con un flujo de calor constante. Muestran la existencia de dos etapas temporales, una inicial inerte, caracterizada por un aumento de la temperatura producido

únicamente por la radiación, y otra de transición en la cual se produce la ignición y donde pueden identificarse dos zonas espaciales, una de reacción-difusión y otra de conducción no estacionaria del calor, que son semejantes a las que aparecen al estudiar el comportamiento de otros sistemas reactivos premezclados (por ejemplo en la propagación de llamas premezcladas se distinguen las zonas reactivo-difusiva). En este trabajo se establecen las ideas para abordar de un modo racional el análisis de la ignición de otros sistemas y además se define un criterio matemáticamente preciso para identificar el instante de ignición: la diferencia entre la temperatura del sólido y la inerte es una pequeña perturbación que en el instante de ignición presenta una singularidad matemática. Este trabajo fue ampliado en [LW2] al incluir la absorción de radiación en el interior del sólido. Olmstead [OL] ha generalizado el análisis de [LW1] al suponer que el flujo de calor es arbitrario, admitir pérdidas de calor por convección en la superficie y tener en cuenta el efecto del consumo de reactante. A partir de [KA1] y [LW1] Kapila [KA2] describió la ignición, explosión y propagación de una llama en un sólido activado por un flujo de calor constante. Niioka y Williams [NW] han analizado la ignición de un sólido cuando su superficie se calienta por efecto de una corriente de gas inerte a alta temperatura.

La ignición producida por el aumento de la temperatura superficial hasta un valor constante en un sólido semiinfinito ha sido también analizada mediante técnicas asintóticas por Liñán y Williams [LW3]. Como en [LW1] es posible identificar una zona de reacción superficial y una región inerte. La evolución temporal puede dividirse en una etapa inicial, en la cual la zona de reacción es cuasiestacionaria (reactivo-difusiva), y otra de transición donde no pueden despreciarse los efectos no estacionarios y en la cual se produce la ignición. Posteriormente [LW4] realizan un análisis similar considerando el efecto del consumo de reactante cuando el número de Lewis es de orden unidad y suponiendo que el sólido está en contacto con una superficie catalítica caliente. Liñán y Kindelán en [LK1] emplean técnicas asintóticas para estudiar la ignición de un medio reactivo mediante un alambre calentado eléctricamente en el caso de sólidos y gases, incluyendo en este último el efecto convectivo. Los resultados incluyen expresiones cerradas para el valor del tiempo de ignición. En [LK2] analizan la ignición mediante un cuerpo caliente e inerte de tamaño finito. Determinan el valor crítico de un parámetro, que mide la pérdida de calor asociada a la curvatura del cuerpo inerte, que separa los regímenes sub y supercríticos. El estudio de la respuesta transitoria de una partícula catalítica en las proximidades del punto de ignición cuando el número de Nusselt no

corresponde a los límites clásicos de Semenov ($N_u \ll 1$) o de Frank-Kamenetskii ($N_u \gg 1$) puede encontrarse en la tesis doctoral de A. Zaragoza [ZA]. Poland *et al.* [PHK] integran numéricamente las ecuaciones correspondientes al primer término del desarrollo asintótico en el caso de sólidos finitos (slab, cilindro y esfera) para distintos valores de la temperatura superficial, obteniendo resultados semejantes a los de [MAG].

1.4 EFFECTOS GEOMETRICOS EN LA TEORIA DE IGNICION

Al considerar la ignición de un sólido finito se encuentra que cuando el número de Damköhler es $D_a \gg 1$ la ignición se produce en una capa delgada próxima a la superficie. Esto es consecuencia de que el espesor de la zona de reacción, ℓ_r , es mucho menor que la longitud típica del sólido, ℓ . Si el período de tiempo en el que se desarrolla la ignición es pequeño la capa calentada por conducción desde la pared es delgada, y el sólido, visto desde la escala asociada a esta capa de conducción, aparece como infinito de manera que la solución correspondiente al sólido semiinfinito desarrollada en [LW3] (lo que constituye un problema universal) puede, en primera aproximación, aplicarse para determinar el tiempo de ignición y la distribución de temperatura.

En el análisis de [LW3] está implícita la hipótesis de que la superficie del sólido es plana. Cuando el sólido es finito aquella no siempre se verificará, de manera que si se pretende aplicar los resultados de [LW3] éstos deberán ser corregidos para tener en cuenta el efecto de la curvatura de la superficie del sólido. Evidentemente la magnitud de esta corrección depende de la curvatura en cada punto medida en la escala de la zona de reacción, que es la escala característica del problema cuando $D_a \gg 1$, y tiene carácter local. Por consiguiente pueden darse situaciones en que la teoría desarrollada en [LW3] no sea globalmente aplicable a un determinado sólido. Esto ocurrirá si en la superficie del mismo existen regiones que desde la escala de la zona de reacción no pueden considerarse casi planas.

El análisis de la influencia de la curvatura en las condiciones de ignición ha sido realizado por Barenblatt [ZE, pp.201-207] para el caso de superficies cilíndricas y esféricas si bien el procedimiento empleado es diferente del que presentamos a continuación. La situación más sencilla corresponde al estudio de la ignición de una mezcla reactiva situada en el espacio comprendido entre dos cilindros concéntricos de radios R_i y R_e ($R_e > R_i$) y tales que el interior sufre una brusca elevación de temperatura pasando ésta de T_o a T_s . En las variables $\xi = r/R_i$ y $\theta = E(T - T_s)/RT_s^2$ el problema

que debe analizarse es:

$$\frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d\theta}{d\xi} \right) + D_a e^\theta = 0 \quad (1.28a)$$

$$\theta(1) = 0, \quad \theta(\xi_e) = -\beta \quad (1.28b)$$

siendo D_a el número de Damköhler calculado a la temperatura T_s con R_i como longitud característica y $\beta = E(T_s - T_o)/RT_s^2$ el número de Zeldovich que suponemos mucho mayor que la unidad. A consecuencia de esta hipótesis existe una región en la cual la reacción está congelada y donde la distribución de temperatura es la que existiría en ausencia de reacción, $\theta = -\beta \ln \xi / \ln \xi_e$, siendo el flujo de calor constante e igual a $\beta / \ln \xi_e$. La zona de reacción está situada en torno a $\xi = 1$ y su estructura depende de la magnitud del número de Damköhler que, como ya hemos señalado, puede interpretarse como el cociente entre el radio interior R_i y el espesor típico de la zona de reacción ℓ_r .

Consideraremos en primer lugar el caso $D_a \gg 1$. La variable apropiada para describir la zona de reacción es $\eta = \beta(\xi - 1)/\ln \xi_e$, pues en ella el flujo de calor es de orden unidad. La condición de acoplamiento entre ambas zonas es que el flujo de calor en la zona de reacción debe tender a una valor constante e igual al de la zona inerte cuando $\eta \rightarrow \infty$. Al introducir la expresión de η en (1.28a) se obtiene, en primera aproximación, el siguiente problema:

$$\frac{d^2\theta}{d\eta^2} + \hat{D}_a e^\theta = 0 \quad (1.29a)$$

$$\theta(0) = 0, \quad \theta_\eta(\infty) = -1 \quad (1.29b)$$

donde $\hat{D}_a = D_a(\ln \xi_e / \beta)^2$ es de orden unidad. Este problema es el mismo que se encontró al analizar la ignición de un slab. Por consiguiente cuando $D_a \gg 1$ la estructura de la zona de reacción es, en primera aproximación, casi plana lo que concuerda con el hecho de ser $R_i \gg \ell_r$. La condición crítica para que tenga lugar la ignición es idéntica a la del caso plano, es decir, $1 < 2\hat{D}_a$, que escrita en variables físicas es

$$\sqrt{2 \frac{RT_s^2}{E} \frac{\rho q B e^{-E/RT_s}}{\lambda}} > \frac{T_s - T_o}{R_i \ln(R_e/R_i)} \quad (1.30)$$

La expresión anterior es totalmente análoga al caso plano excepto en el término de la derecha que representa la derivada de la temperatura inerte en el cilindro interior. Cuando $D_a \gg 1$ la curvatura sólo interviene a través del flujo de calor asociado a

la temperatura inerte, pero no directamente en la zona de reacción que es plana. Si además de ser $D_a \gg 1$ es $(R_e - R_i)/R_i \ll 1$ el flujo de calor entre ambos cilindros es prácticamente unidimensional en cuyo caso se recupera a partir de (1.30) la condición unidimensional pues $R_i \ln(R_e/R_i) \simeq R_e - R_i$.

En el caso $D_a = \mathcal{O}(1)$ la reacción tiene lugar en $\xi = \mathcal{O}(1)$. Si el radio exterior ξ_e es también de orden unidad el problema no corresponde a uno de ignición sino de explosión térmica. Suponemos por tanto que en este caso es $\xi_e \gg 1$ ($R_e \gg R_i$). Esta situación aparece, por ejemplo, al analizar la ignición mediante un alambre calentado eléctricamente [LK1]. El problema para la zona de reacción es:

$$\frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d\theta}{d\xi} \right) + D_a e^\theta = 0 \quad (1.31a)$$

$$\theta(1) = 0, \quad -\xi \frac{d\theta}{d\xi} \Big|_{\xi=\infty} = \frac{\beta}{\ln(R_e/R_i)} \quad (1.31b)$$

donde la condición de contorno en $\xi = \infty$ representa de nuevo el acoplamiento con la zona inerte. Para analizar el problema anterior es conveniente observar que la ecuación (1.31a) es invariante ante el grupo de transformaciones:

$$\xi \rightarrow a\xi, \quad \theta \rightarrow b + \theta, \quad e^b a^2 = 1 \quad (1.32)$$

de manera que tomando como nuevas variables

$$u = D_a \xi^2 e^\theta, \quad \omega = -\xi \theta_\xi \quad (1.33)$$

(1.31a) adopta la forma:

$$\frac{du}{d\omega} = 2 - \omega \quad (1.34)$$

que puede integrarse una vez para dar

$$\omega^2 - 4\omega + 2u = \text{cte} \quad (1.35)$$

Cuando $\xi \gg 1$ el flujo de calor es aproximadamente constante e igual a

$$\omega_\infty = \frac{\beta}{\ln(R_e/R_i)} \quad (1.36)$$

y a partir de la definición de ω obtenemos que la temperatura es $\theta = -\omega_\infty \ln \xi + \text{cte}$ con lo cual $u \sim D_a \xi^{2-\omega_\infty}$. Si suponemos $\omega_\infty > 2$ (el análisis correspondiente al caso $\omega_\infty \leq 2$ es más complicado) podemos tomar $u_\infty \simeq 0$ y la ecuación (1.35) pasa a ser

$$\omega^2 - 4\omega + 2u - \omega_\infty^2 + 4\omega_\infty = 0 \quad (1.37)$$

La relación anterior permite calcular el flujo de calor ω en cada punto si se conoce u . En particular en $\xi = 1$ se tiene

$$\omega_1^2 - 4\omega_1 + 2D_a - \omega_\infty^2 + 4\omega_\infty = 0 \quad (1.38)$$

de donde

$$\omega_1 = 2 \pm \sqrt{(\omega_\infty - 2)^2 - 2D_a} \quad (1.39)$$

La existencia de solución requiere

$$\omega_\infty - 2 \geq \sqrt{2D_a} \quad (1.40)$$

y por tanto la ignición se produce si

$$2 + \sqrt{2D_a} > \omega_\infty \quad (1.41)$$

que en variables físicas es

$$\frac{2}{R_i} \frac{RT_s^2}{E} + \sqrt{2 \frac{RT_s^2}{E} \frac{\rho q B e^{-E/RT_s}}{\lambda}} > \frac{T_s - T_o}{R_i \ln(R_e/R_i)} \quad (1.42)$$

La curvatura en este caso, $D_a = \mathcal{O}(1)$ ó $R_i/\ell_r = \mathcal{O}(1)$, afecta no.sólo a la distribución inerte de temperatura, al igual que en caso $D_a \gg 1$, sino también a la zona de reacción que ya no puede suponerse plana. El término representativo de este último efecto, $2RT_s^2/R_i E$, pierde importancia a medida que R_i aumenta, de forma que cuando $R_i \gg \ell_r$ puede despreciarse recuperándose el resultado correspondiente a $D_a \gg 1$.

Otra característica de la superficie de un sólido que puede modificar notablemente el proceso de ignición es la rugosidad. Su efecto puede analizarse cualitativamente de la siguiente manera. Consideremos por simplicidad un "slab" semiinfinito cuya superficie tenga el perfil de una senoide. Si la amplitud de la misma es mucho menor que ℓ_r las diferencias de temperatura que aparecen inducidas por la rugosidad una vez que se ha elevado la temperatura superficial son anuladas por la conducción de calor antes de que se produzca la ignición, de forma que ésta tiene lugar como si la superficie fuese plana. El mismo resultado se encuentra si la amplitud y el radio de curvatura son mucho mayores que ℓ_r . La zona de reacción adopta la forma de la superficie pero localmente puede considerarse plana. Por último si ambos son del orden de ℓ_r la curvatura afecta a la zona de reacción pues las regiones convexas reciben un flujo de calor mayor que las cóncavas, y por tanto alcanzan antes las condiciones para que se produzca la ignición, siendo ahora este proceso notablemente bidimensional. Conviene notar que la longitud ℓ_r depende de la temperatura T_s , de modo que un mismo sólido puede encontrarse en una u otra situación dependiendo de la intensidad del calentamiento a que esté sometido.

No es éste el único caso en que debe considerarse el proceso de ignición como bidimensional. Cuando la superficie presenta aristas o disposiciones geométricas que fuerzan la convergencia de las líneas de flujo de calor el tiempo necesario para producir la ignición se reduce notablemente respecto del unidimensional. Recientemente Hermance y Vorsteveld [HV] han analizado la ignición de un sólido bidimensional semiinfinito que en un sistema de coordenadas cartesianas ocupa el primer cuadrante, cuando su superficie es expuesta a un flujo constante de calor. Esta situación es análoga a la estudiada en [LW1] pero con una geometría apropiada que permite obtener conclusiones acerca de la influencia de la curvatura en el caso límite en que ésta es infinita. El análisis realizado no emplea técnicas asintóticas sino que procede mediante la integración numérica de las ecuaciones incluyendo el consumo de reactante. A partir de los resultados numéricos obtienen una correlación entre el tiempo de ignición y los parámetros adimensionales relacionados con el flujo de calor y la energía de activación. Encuentran que el tiempo de ignición se reduce respecto del unidimensional en un factor de 2.5 a 3.4, dependiendo del valor de los parámetros.

1.5 ORDEN DE MAGNITUD DEL TIEMPO DE IGNICION

Al considerar la teoría no estacionaria de la ignición una de las tareas previas es encontrar, mediante estimaciones de órdenes de magnitud de los diversos términos que intervienen en las ecuaciones, el orden de magnitud del tiempo de ignición.

Los tiempos característicos que hemos encontrado hasta el momento son t_α y t_q . El primero representa el tiempo necesario para que el calor se transmita por conducción a una distancia ℓ y se obtiene mediante el balance de los términos de la ecuación de conducción $\rho c_p \delta T / t_\alpha \sim \lambda \delta T / \ell^2$, de donde

$$t_\alpha = \frac{\rho c_p \ell^2}{\lambda} = \frac{\ell^2}{\alpha}$$

siendo $\alpha = \lambda / \rho c_p$ la difusividad térmica. El tiempo químico es el que transcurre durante una explosión térmica homogénea hasta que se generan incrementos de temperatura del orden de la de Frank-Kamenetskii, RT_c^2/E , y se obtiene a partir de $\rho c_p (RT_c^2/E) / t_q \sim \rho q B e^{-E/RT_c}$, de forma que

$$t_q = \frac{c_p R T_c^2}{q B E e^{-E/RT_c}}$$

siendo T_c es la temperatura característica del problema.

Cuando la ignición se produce a causa de un incremento brusco en la temperatura superficial, se encuentra que, bajo ciertas condiciones, los efectos no estacionarios están básicamente asociados a la propagación de la onda térmica generada por este incremento, estableciéndose lo que hemos denominado distribución inerte de temperatura. Al cabo de un tiempo δt el espesor de la capa calentada por la onda térmica, o capa de conducción, está dado por

$$\ell_t \sim \sqrt{\alpha \delta t}$$

En este caso la zona de reacción puede considerarse como reactivo-difusiva y cuando el incremento de temperatura es del orden de δT el espesor de la misma, ℓ_r , se determina mediante $\lambda \delta T / \ell_r^2 \sim \rho q B e^{-E/RT_s}$. En particular cuando se produce la ignición los incrementos son del orden de RT_s^2/E y el espesor es

$$\ell_r \sim \sqrt{\frac{\lambda RT_s^2}{\rho q B E e^{-E/RT_s^2}}}$$

A partir de la definición del número de Damköhler se obtiene que el espesor de la zona de reacción relativo al tamaño del sólido es el inverso de la raíz cuadrada del número de Damköhler:

$$\frac{\ell_r}{\ell} = \frac{1}{\sqrt{D_a}}$$

siendo la zona de reacción muy delgada cuando $D_a \gg 1$.

Debido a que los efectos no estacionarios no intervienen en la ecuación de la zona de reacción, el orden de magnitud del tiempo de ignición no puede determinarse a partir de ésta, sino que debe hacerse mediante una condición que represente el acoplamiento entre la zona de reacción cuasiestacionaria y la capa de conducción no estacionaria. Evidentemente el tiempo químico es un límite inferior del orden de magnitud del tiempo de ignición, que corresponde al caso en que la difusividad térmica es muy grande y todo el sólido alcanza la temperatura T_s de forma casi instantánea produciéndose a continuación la explosión térmica. El límite superior es el tiempo de conducción basado en la longitud característica del sólido.

Una vez que en el término de reacción se ha realizado la transformación de Frank-Kamenetskii, con T_s como temperatura característica, es fácil comprobar que la reacción química sólo cuenta donde la temperatura difiera de T_s en cantidades de orden RT_s^2/E . Si el espesor de la capa de conducción es ℓ_t y suponemos que la temperatura varía linealmente desde T_s a T_o , el espesor de la zona de reacción es $\ell'_r = \ell_t RT_s^2 / E (T_s -$

$T_o) = \varepsilon \ell_t$ que crece con el tiempo al igual que ℓ_t (la relación $\ell'_r = \varepsilon \ell_t$ es consecuencia directa de la hipótesis de Zeldovich). En el instante de ignición el espesor de la zona de reacción es ℓ_r y por tanto el de conducción debe ser $\ell_t \sim \ell_r/\varepsilon$, con lo cual el tiempo de ignición es

$$t_{ig} \sim \frac{\ell_r^2}{\alpha \varepsilon^2} = \frac{\rho c_p \ell_r^2}{\lambda \varepsilon^2}$$

Teniendo en cuenta que $\rho c_p \ell_r^2/\lambda$ es el tiempo químico t_q a la temperatura T_s , se obtiene que el tiempo de ignición relativo al químico es

$$\frac{t_{ig}}{t_q} \sim \varepsilon^{-2} \gg 1 \quad (1.43)$$

Si referimos t_{ig} al de conducción mediante $t_q = t_\alpha/D_a$ obtenemos

$$\frac{t_{ig}}{t_\alpha} \sim \frac{1}{\varepsilon^2 D_a} \quad (1.44)$$

Por tanto el tiempo de ignición es siempre muy grande frente al químico pero puede ser pequeño frente al de conducción ($\varepsilon^2 D_a \gg 1$) o del mismo orden ($\varepsilon^2 D_a = \mathcal{O}(1)$).

La hipótesis relativa a la distribución de temperatura inerte desempeña un papel fundamental para determinar el orden de magnitud de t_{ig} . Si existen factores geométricos que puedan alterar ésta modificarán igualmente a t_{ig} . Por ejemplo cuando el sólido tiene esquinas la distribución de temperatura inerte cambia y no puede suponerse lineal cerca de la pared ni siquiera al realizar estimaciones de órdenes de magnitud. En este caso, como veremos más adelante en el capítulo 4, la relación anterior entre el tiempo de ignición y el químico es

$$\frac{t_{ig}}{t_q} \sim \varepsilon^{-\sigma} \quad (1.45)$$

donde $\sigma = 2\theta_o/\pi$ que verifica $0 < \sigma < 2$, siendo θ_o el ángulo de la esquina. En consecuencia si la superficie del sólido presenta una arista siempre se reduce el tiempo de ignición. En particular cuando el ángulo es recto se tiene

$$\frac{t_{ig}}{t_q} \sim \varepsilon^{-1} \quad (1.46)$$

y

$$\frac{t_{ig}}{t_\alpha} \sim \frac{1}{\varepsilon D_a} \quad (1.47)$$


En los casos en que el tiempo de ignición sea muy pequeño frente al de conducción, el espesor de la capa de conducción durante el proceso es pequeño frente

al tamaño del sólido y esto permite considerar el sólido como infinito. Por tanto el tiempo de ignición no depende de la longitud característica del sólido y el problema tiene carácter universal.

1.6 OBJETIVOS DE LA TESIS

El objetivo de este trabajo es analizar, mediante el empleo de técnicas asintóticas, el proceso de ignición cuando a causa de los efectos geométricos éste no puede considerarse unidimensional, eligiendo para ello configuraciones geométricas sencillas. Supondremos que la ignición es originada por el aumento de la temperatura superficial mediante una función escalón tal que el número de Damköhler a la nueva temperatura superficial sea supercrítico. Incluiremos los efectos no estacionarios que, en la mayoría de los casos, podrán asociarse, en primera aproximación, a la distribución inerte de temperatura lo que da lugar a una zona de reacción cuya estructura es cuasiestacionaria. Los resultados permitirán describir la evolución de la temperatura durante el proceso y determinar el tiempo de ignición. En los casos cuyas geometrías sean las más representativas calcularemos la corrección que se obtiene al considerar los efectos no estacionarios en la zona de reacción, que en la etapa final no son despreciables.

En el capítulo 2 estudiaremos desde un punto de vista general el efecto de la curvatura en la ignición de un sólido cuya superficie no es plana y en la cual el radio de curvatura es del orden de la longitud característica del mismo. Supondremos $\varepsilon^2 D_a \gg 1$, de manera que el tiempo de ignición es pequeño frente al de conducción, lo que permite considerar el sólido como infinito. A continuación, capítulo 3, analizaremos la ignición en el caso límite de curvatura infinita, es decir, cuando existe una arista en la superficie del sólido definida por dos planos que forman un ángulo recto. Consideraremos que el sólido es infinito lo que corresponde al límite $\varepsilon D_a \gg 1$. El análisis asintótico reducirá la ecuación de conducción del calor a un problema elíptico no lineal en un dominio no acotado cuya solución numérica requerirá un tratamiento especial de la condición de contorno en el infinito. Este análisis se generalizará en el capítulo 4 donde resolveremos el problema de la ignición de un sólido bidimensional con forma de cuña cuyo ángulo es arbitrario. Con el fin de realizar un análisis sistemático las hipótesis relativas al orden de magnitud del tiempo de ignición serán las mismas que en el capítulo anterior, es decir $t_{ig} \sim t_q/\varepsilon$ y $t_{ig}/t_\alpha \sim 1/\varepsilon D_a \ll 1$, en lugar de $t_{ig}/t_q \sim \varepsilon^{-\sigma}$ y $t_{ig}/t_\alpha \sim 1/\varepsilon^\sigma D_a \ll 1$, lo que hace que este análisis pueda ser inadecuado cuando el exponente σ difiera apreciablemente de la unidad. El modelo propuesto puede aplicarse al estudio



de situaciones tridimensionales cuyo caso límite es la presencia de un punto singular en la superficie. El caso representativo más simple, a causa de la simetría, es el de un cono que resolveremos para distintos valores del semiángulo. Los resultados de los problemas universales analizados en los capítulos 2 y 3 serán aplicados en el capítulo 5 a sólidos finitos que tengan alguna de estas configuraciones geométricas. Consideraremos tres situaciones diferentes: números de Damköhler grandes frente a la unidad (capa de reacción delgada) pero tales que la capa de conducción es, respectivamente, pequeña frente al tamaño del sólido y del mismo orden que éste, y números de Damköhler de orden unidad. En este último caso desarrollaremos una teoría asintótica de la ignición que puede aplicarse cuando el tamaño de la zona de reacción es similar al del sólido. Finalmente en el capítulo 6 estudiaremos la influencia del consumo de reactante en los casos de un sólido semiinfinito cuya superficie es plana y cuando ésta tenga una esquina. Los principales resultados y conclusiones se recogerán en el capítulo 7, donde también mencionaremos las posibles líneas en que este trabajo puede continuar.

CAPITULO 2

EFEECTO DE LA CURVATURA EN LA IGNICION DE SOLIDOS

2.1 INTRODUCCION Y FORMULACION

El análisis del proceso de ignición de un sólido semiinfinito cuya temperatura superficial aumenta en un instante dado y se mantiene constante en los instantes posteriores ha sido realizado por Liñán y Williams [LW3]. Mediante el empleo de técnicas asintóticas en las que la energía de activación adimensional es considerada como un parámetro grande frente a la unidad, se muestra la existencia de una zona de reacción superficial cuyo espesor relativo al de la zona de calentamiento es del orden del inverso de la energía de activación y que, en primera aproximación, es cuasiestacionaria. En esta zona de reacción se genera un incremento de temperatura respecto de la inicial y parte del calor producido se propaga al interior del sólido a través de una zona de conducción inerte situada a continuación.

Cuando el sólido es finito es posible aplicar las ideas anteriores si se verifica la condición de que en tiempos del orden del tiempo de ignición la onda térmica se propague a distancias muy pequeñas comparadas con el tamaño característico del sólido, de manera que en la escala asociada a la conducción el sólido aparece como infinito. Como hemos visto en el capítulo anterior esto es equivalente a que se verifique $\epsilon^2 D_a \gg 1$.

El objeto de este capítulo es incluir una primera corrección en la descripción del proceso de ignición que tenga en cuenta el efecto de la curvatura local de la superficie cuando ésta es de orden unidad en la escala del tamaño del sólido, de manera que la zona de reacción aparece como casi plana. Como mostraremos a continuación al retener la corrección no se modifica el carácter unidimensional de las ecuaciones.

El problema matemático puede formularse como:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + \rho q B \exp(-E/RT) \quad (2.1a)$$

$$T(t = 0) = T_o \text{ en } \Omega, \quad T(t > 0) = T_s \text{ en } \partial\Omega \quad (2.1b)$$

donde Ω es un dominio acotado de \mathbf{R}^2 ó \mathbf{R}^3 , cuya frontera $\partial\Omega$ (Γ si $\Omega \subset \mathbf{R}^2$ y S si $\Omega \subset \mathbf{R}^3$) se supone suficientemente lisa de manera que en cada punto tengan sentido las definiciones usuales de curvatura. Si la longitud característica de Ω es ℓ supondremos que la curvatura media de S y la curvatura de Γ son de orden $1/\ell$.

Al adimensionalizar las ecuaciones aparecen los parámetros $\alpha = (T_s - T_o)/T_s$ y $\varepsilon = RT_s/\alpha E$. Definimos las siguientes variables adimensionales: $\tau = t/t_c$, $\bar{r} = \bar{x}/\ell$ y $\varphi = (T - T_o)/(T_s - T_o)$ donde

$$t_c = \frac{\alpha D c_p T_s}{2\pi \varepsilon q B e^{-E/RT_s}} \quad (2.2)$$

siendo D un parámetro adimensional de orden unidad cuyo valor se determinará con la condición de que la ignición se produzca en $\tau = 1$. Al introducir las nuevas variables en (2.1) obtenemos:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \nu^2 \Delta \varphi + \frac{D}{2\pi \varepsilon} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad (2.3a)$$

$$\varphi(\tau = 0) = 0 \text{ en } \Omega, \quad \varphi(\tau > 0) = 1 \text{ en } \partial\Omega \quad (2.3b)$$

donde

$$\nu = \frac{\ell_c}{\ell} \quad (2.4a)$$

y

$$\ell_c = \left[\frac{\alpha \lambda D T_s}{2\pi \varepsilon \rho q B e^{E/RT_s}} \right]^{1/2} = \left[\frac{\lambda}{\rho c_p} t_c \right]^{1/2} \quad (2.4b)$$

representa la distancia recorrida por la onda térmica en $\tau = \mathcal{O}(1)$. Si $\nu = \ell_c/\ell \ll 1$ la conducción de calor sólo cuenta en una capa delgada próxima a la superficie cuyo espesor es del orden de ν . Las variaciones de temperatura en distancias normales a $\partial\Omega$ de orden ν son de orden unidad, mientras que en la dirección tangente a $\partial\Omega$ son mucho más pequeñas. Para poner de manifiesto este hecho y eliminar el factor ν^2 que aparece en (2.3a) adoptaremos un nuevo sistema de coordenadas, una de las cuales tendrá la dirección de la normal.

Cuando $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ las nuevas coordenadas son la longitud de arco, s , medida a lo largo de Γ y la distancia, $\nu\xi$, medida sobre \bar{n} normal unitaria a Γ en cada punto. En este sistema la expresión del operador Δ es

$$\Delta = \frac{1}{\nu^2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{1}{\nu} \frac{k}{1 - \nu k \xi} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{1}{(1 - \nu k \xi)^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\nu k \xi}{1 - \nu k \xi} \frac{\partial}{\partial s} \right] \quad (2.5)$$

donde $k = k(s)$ es la curvatura de Γ en las variables \bar{r} y, por tanto, es de orden unidad. La expresión anterior, y la que deduciremos cuando $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, pueden obtenerse a partir de la definición del operador de Laplace en un sistema de coordenadas ortogonales arbitrario una vez calculados los elementos de la matriz métrica.

Si multiplicamos (2.5) por ν^2 y desarrollamos en potencias de ν podemos poner

$$\nu^2 \Delta = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{\nu}{R'} \frac{\partial}{\partial \xi} + o(\nu) \quad (2.6)$$

donde $R' = 1/k$ es el radio de curvatura local medido en la escala de ℓ . El efecto de las derivadas según s aparece en los términos de orden ν^2 y superiores y no será tenido en cuenta.

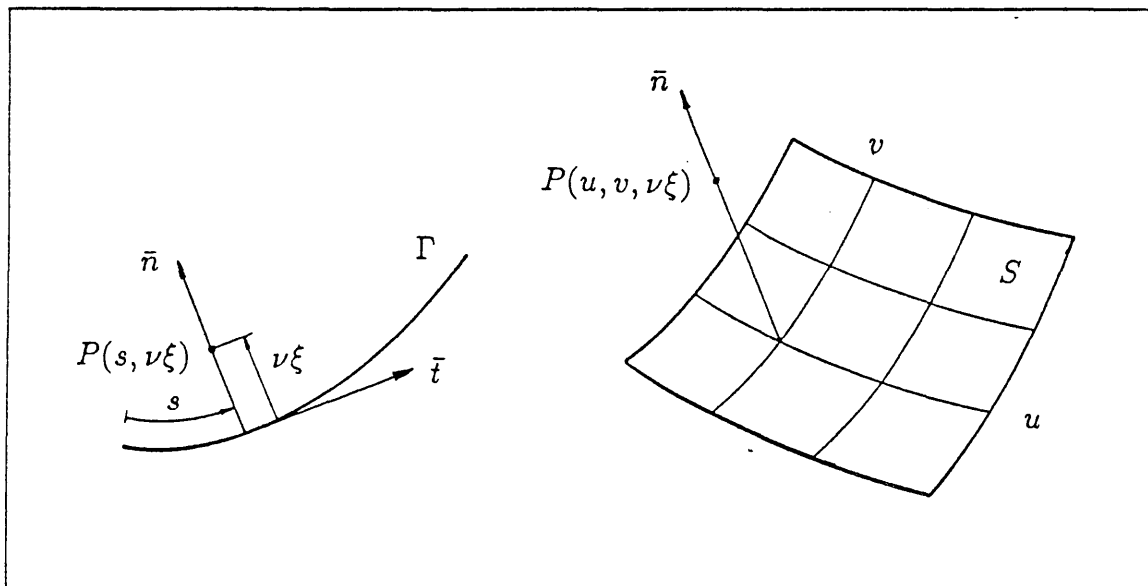


Figura 2.1 Coordenadas en la capa de conducción.

Si $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ el sistema de coordenadas está formado por la distancia $\nu\xi$ medida sobre \bar{n} y las coordenadas curvilíneas (u, v) definidas sobre S tales que la parametrización $\bar{r} = \bar{r}(u, v)$ de S sea regular. Aunque las coordenadas (u, v) pueden ser tan generales

como se desee, usaremos, por simplicidad, aquéllas cuyas líneas paramétricas son líneas de curvatura, de manera que la expresión de Δ es:

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{\tilde{E}\tilde{G}}} \left\{ \frac{1}{\nu^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\sqrt{\tilde{E}\tilde{G}} \frac{\partial}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial u} \left[\sqrt{\tilde{G}/\tilde{E}} \frac{\partial}{\partial u} \right] + \frac{\partial}{\partial v} \left[\sqrt{\tilde{E}/\tilde{G}} \frac{\partial}{\partial v} \right] \right\} \quad (2.7)$$

donde $\tilde{E} = E(1 - 2\nu k_1 \xi + \nu^2 k_1^2 \xi^2)$ y $\tilde{G} = G(1 - 2\nu k_2 \xi + \nu^2 k_2^2 \xi^2)$ siendo E y G los coeficientes de la primera forma fundamental de S y k_1 y k_2 las curvaturas principales que, en este sistema, pueden escribirse mediante los coeficientes e y g de la segunda forma fundamental de S como $k_1 = e/E$ y $k_2 = g/G$.

Al multiplicar (2.7) por ν^2 y desarrollar llegamos a

$$\nu^2 \Delta = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{\nu}{R''} \frac{\partial}{\partial \xi} + o(\nu) \quad (2.8)$$

donde R'' es de orden unidad y puede expresarse como

$$\frac{1}{R''} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$$

siendo $R_1 = 1/k_1$ y $R_2 = 1/k_2$ los radios de curvatura principales medidos también en la escala de ℓ .

Utilizando (2.7) y (2.8) la ecuación (2.3a) puede ponerse en la siguiente forma:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} - \frac{\nu}{R} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + \frac{D}{2\pi\epsilon} \exp \left[\frac{1}{\epsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] + o(\nu) \quad (2.9a)$$

donde R es R' ó R'' según el dominio Ω considerado.

Las condiciones de contorno e iniciales (2.3b) deben ser complementadas con una condición en $\xi \rightarrow \infty$, que sea compatible con la condición inicial y con (2.9a) cuando las derivadas respecto ξ sean nulas. $\varphi(\infty, \tau) = 0$ y $\varphi_\xi(\infty, \tau) = 0$ son compatibles con la condición inicial pero la primera no verifica (2.9a) y, por consiguiente debe emplearse la segunda, con lo cual la forma correcta de (2.3b) es:

$$\varphi(\xi, 0) = \varphi(0, \tau) - 1 = \varphi_\xi(\infty, \tau) = 0 \quad (2.9b)$$

2.2 SOLUCION INERTE

Es útil considerar como variable dependiente la diferencia entre la temperatura φ y la que existiría si el sólido no fuese reactivo. Esta última está dada por la

solución del problema:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial \xi^2} - \frac{\nu}{R} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} \quad (2.10a)$$

$$\varphi_i(\xi, 0) = \varphi_{i,\xi}(\infty, \tau) = 0, \quad \varphi_i(0, \tau) = 1 \quad \tau > 0 \quad (2.10b)$$

Aunque (2.10) tiene solución analítica que puede calcularse mediante la transformada de Laplace, dado que en (2.10a) se han omitido los términos de orden superior a ν , buscaremos la solución en forma de desarrollo en serie de potencias de ν y localizaremos sus dos primeros términos.

Si llevamos $\varphi_i = \varphi_o + \nu \varphi_1 + o(\nu)$ obtenemos a partir de (2.10a) los problemas:

$$\frac{\partial \varphi_o}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \varphi_o}{\partial \xi^2}; \quad \varphi_o(\xi, 0) = \varphi_o(0, \tau) - 1 = \varphi_{o,\xi}(\infty, \tau) = 0 \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \varphi_1}{\partial \xi^2} - \frac{1}{R} \frac{\partial \varphi_o}{\partial \xi}; \quad \varphi_1(\xi, 0) = \varphi_1(0, \tau) = \varphi_{1,\xi}(\infty, \tau) = 0 \quad (2.12)$$

La solución de (2.11) es $\varphi_o = \text{erfc}(\xi/2\sqrt{\tau})$ y la de (2.12) puede obtenerse mediante la transformada de Laplace. Si designamos mediante $\bar{f}(\xi, s)$ a la transformada de $f(\xi, \tau)$, $\mathcal{L}[f(\xi, \tau)]$, de (2.12) encontramos:

$$\frac{d^2 \bar{\varphi}_1}{d\xi^2} - s \bar{\varphi}_1 = -\frac{\exp(-\sqrt{s}\xi)}{R\sqrt{s}} \quad (2.13)$$

que resuelta con $\bar{\varphi}_1(0) = \bar{\varphi}_{1,\xi}(\infty) = 0$ proporciona $\bar{\varphi}_1 = \xi \exp(-\sqrt{s}\xi)/2s$, y mediante la fórmula de inversión llegamos a $\varphi_1 = \xi \text{erfc}(\xi/2\sqrt{\tau})/2R$.

Por tanto φ_i puede escribirse como:

$$\varphi_i = \left(1 + \nu \frac{\xi}{2R}\right) \text{erfc}\left(\frac{\xi}{2\sqrt{\tau}}\right) + o(\nu) \quad (2.14)$$

Tomando como nueva variable $\tilde{\psi} = \varphi - \varphi_i$, (2.9) es:

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial \xi^2} - \frac{\nu}{R} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \xi} + \frac{D}{2\pi\epsilon} \exp\left[\frac{1}{\epsilon} \frac{\tilde{\psi} + \varphi_i - 1}{1 + \alpha(\tilde{\psi} + \varphi_i - 1)}\right] \quad (2.15a)$$

$$\tilde{\psi}(\xi, 0) = \tilde{\psi}(0, \tau) = \tilde{\psi}_\xi(\infty, \tau) = 0 \quad (2.15b)$$

2.3 ZONA DE REACCION

De (2.15a) se deduce que el término de reacción interviene sólo cuando $\tilde{\psi} + \varphi_i - 1$ es de orden ε . Si utilizamos el desarrollo de la función erfc podemos poner:

$$\varphi_i - 1 = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\xi}{2\sqrt{\tau}} \left(1 - \nu \frac{\sqrt{\pi\tau}}{2R}\right) + o(\xi, \nu) \quad (2.16)$$

de manera que tanto $\tilde{\psi}$ como ξ deben ser de orden ε . Tomando como variables para la zona de reacción $\psi = \tilde{\psi}/\varepsilon$ y $\zeta = \xi/\varepsilon\sqrt{\pi\tau}$, y teniendo en cuenta (2.16), obtenemos de (2.15a) y después de linealizar el argumento de la función exponencial en el término de reacción la siguiente ecuación para la región interior:

$$\pi\varepsilon^2 \left[\tau \frac{\partial\psi}{\partial\tau} - \frac{\zeta}{2} \frac{\partial\psi}{\partial\zeta} \right] = \frac{\partial^2\psi}{\partial\zeta^2} - \varepsilon \frac{\nu}{R} \sqrt{\pi\tau} \frac{\partial\psi}{\partial\zeta} + \frac{D\tau}{2} \exp \left[\psi - \zeta \left(1 - \nu \frac{\sqrt{\pi\tau}}{2R}\right) \right] + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \quad (2.17)$$

en la cual la curvatura interviene a través del término convectivo $-(\varepsilon\nu\sqrt{\pi\tau}/R)\psi_\zeta$ y del término $\nu\zeta\sqrt{\pi\tau}/2R$ que aparece en la exponencial. Teniendo en cuenta que la longitud característica de la zona de reacción es $\ell_r = \varepsilon\ell_c$, el factor $\varepsilon\nu/R$, que define el orden de magnitud del primero, es el cociente entre ℓ_r y el radio de curvatura. Por tanto mientras éste sea mucho mayor que ℓ_r la curvatura no afecta directamente a la estructura de la zona de reacción, sino que lo hace a través del segundo término que está asociado a la temperatura inerte. Por otra parte éste sólo debe retenerse cuando se verifique $\varepsilon \ll \nu$, pues en caso contrario los términos que hemos omitido al linealizar el término de Arrhenius, y que son de orden ε , serían tan importantes o más que los que estamos reteniendo. En consecuencia cuando $\varepsilon \gtrsim \nu$, esto es, cuando el radio de curvatura en la escala de ℓ_c sea de orden ε^{-1} o mayor, el efecto de la curvatura es despreciable incluso en la temperatura inerte, de manera que la superficie puede considerarse como plana.

Llamando $\eta = \zeta(1 - \nu\sqrt{\pi\tau}/2R)$ y suponiendo que la derivada temporal de ψ así como el término convectivo $-(\zeta/2)\partial\psi/\partial\zeta$ son de orden unidad (2.17) es:

$$0 = \frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2} + \frac{\lambda}{2} \exp[\psi - \eta] + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \quad (2.18)$$

que constituye una primera aproximación para describir la evolución de la temperatura en la zona de reacción. El tiempo interviene a través de la nueva variable temporal $\lambda = D\tau(1 - \nu\sqrt{\pi\tau}/2R)^{-2}$ que tiene en cuenta la influencia de la curvatura.

La ecuación (2.18) debe complementarse con la condición de contorno en $\eta = 0$, $\psi(0, \tau) = 0$, y una condición de contorno en $\eta \rightarrow \infty$ que habrá de deducirse de las condiciones de empalme con la solución exterior. Para resolver (2.18) es conveniente usar como variable $u = \psi - \eta$. Una primera integración proporciona:

$$\frac{du}{d\eta} = -\sqrt{\lambda(1 - e^u) + a^2} + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \quad (2.19)$$

donde $a(\tau) = -u_\eta(0, \tau) = 1 - \psi_\eta(0, \tau)$ es una constante de integración que deberá ser determinada posteriormente. Integrando nuevamente se obtiene:

$$\psi = \left[1 - \sqrt{\lambda + a^2} + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \right] \eta + 2 \ln \left[\frac{2\sqrt{\lambda + a^2} (\sqrt{\lambda + a^2} - a)}{\lambda + (\sqrt{\lambda + a^2} - a)^2 \exp(-\eta\sqrt{\lambda + a^2})} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \quad (2.20)$$

Para realizar el acoplamiento con la solución exterior debe emplearse el desarrollo de (2.20) para $\eta \rightarrow \infty$:

$$\psi \sim \left[\sqrt{\lambda + a^2} + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \right] \eta + \ln [F(a, \lambda)] + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) + \text{t.e.p.} \quad (2.21)$$

$$\text{donde } F(a, \lambda) = \frac{4(\lambda(\tau) + a(\tau)^2)}{\left(\sqrt{\lambda(\tau) + a(\tau)^2} + a(\tau) \right)^2}.$$

2.4 ZONA INERTE

Cuando $\xi = \mathcal{O}(1)$ la diferencia $\varphi_i - 1$ es negativa y de orden unidad de manera que la reacción química aparece congelada. En esta región exterior tiene lugar la conducción de calor desde la zona de reacción hacia el interior del sólido. La ecuación correspondiente, que se obtiene eliminando en (2.15a) el término de reacción, es:

$$\frac{\partial \psi_c}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \psi_c}{\partial \xi^2} - \frac{\nu}{R} \frac{\partial \psi_c}{\partial \xi} \quad (2.22)$$

Las condiciones de contorno e iniciales (2.15b) deben ser modificadas ya que ahora $\xi = 0$ no corresponde a la superficie del sólido sino a la región intermedia donde ambas soluciones, exterior e interior, son válidas. Por tanto $\psi_c(0, \tau)$ representa el incremento de temperatura respecto de la inerte generado por la zona de reacción. Su valor se deduce al realizar el acoplamiento de las soluciones exterior e interior. Para ello [KC, p.15]

consideremos el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ realizado en ξ_σ fijo, con $\xi_\sigma = \xi/\sigma(\varepsilon)$ donde $\varepsilon \ll \sigma(\varepsilon) \ll 1$. La condición que debe verificarse para el acoplamiento a $\mathcal{O}(1)$ es:

$$\lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ \xi_\sigma = \text{cte}}} \left\{ \varepsilon \psi \left(\frac{\sigma \varepsilon_\sigma}{\varepsilon}, \tau \right) - \psi_c(\sigma \xi_\sigma, \tau) \right\} = 0 \quad (2.23)$$

Como $\sigma \xi_\sigma / \varepsilon \rightarrow \infty$ podemos usar (2.21) con lo cual (2.23) es:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \left(1 - \sqrt{\lambda + a^2} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{\pi \tau}} - \frac{\nu}{2R} \right) \sigma \varepsilon_\sigma + \varepsilon \ln [F(a, \lambda)] - \psi_c(\sigma \xi_\sigma, \tau) \right\} = 0 \quad (2.24)$$

Para que (2.24) se verifique es necesario:

$$\psi_c(0, \tau) = \varepsilon \ln \left[4 \left(\frac{\lambda + a^2}{\sqrt{\lambda + a^2} + a^2} \right) \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2, \varepsilon \nu^2) \quad (2.25)$$

El acoplamiento a $\mathcal{O}(\varepsilon)$ implica la condición

$$\lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ \xi_\sigma = \text{cte}}} \left\{ \frac{\varepsilon \psi(\sigma \xi_\sigma / \varepsilon, \tau) - \psi(\sigma \xi_\sigma, \tau)}{\varepsilon} \right\} = 0 \quad (2.26)$$

Escribiendo $\psi_c(\sigma \xi_\sigma, \tau) = \psi_c(0, \tau) + \sigma \xi_\sigma \psi_{c,\xi}(0, \tau) + \mathcal{O}(\sigma^2)$ y empleando (2.21) y (2.25) se deduce:

$$\psi_{c,\xi}(0, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi \tau}} \left(1 - \nu \frac{\sqrt{\pi \tau}}{2R} \right) \left(1 - \sqrt{\lambda + a^2} \right) + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \quad (2.27)$$

La ecuación anterior muestra que la zona de reacción no sólo impone a la zona inerte la temperatura en $\xi = 0$ dada por (2.25), sino también el flujo de calor dado por (2.27).

La ecuación (2.22) debe ahora resolverse con $\psi_{c,\xi}(\infty, \tau) = 0$ y una de las condiciones (2.25) ó (2.27). La solución obtenida debe ser compatible con la otra condición y esto proporciona una ecuación para determinar la función $a(\tau)$.

Esta ecuación puede obtenerse mediante uno de los dos siguientes procedimientos: considerar como dato $\psi_c(0, \tau)$, resolver (2.22) y después calcular $\psi_{c,\xi}(0, \tau)$, o bien dar como dato $\psi_{c,\xi}(0, \tau)$, resolver (2.22) para obtener $\psi_c(\xi, \tau)$ y calcular $\psi_c(0, \tau)$. Cualquiera de ellos conduce a una ecuación integral y aquí emplearemos el segundo por ser algo más breve. Mediante la transformada de Laplace el problema para la zona de conducción inerte

$$\frac{\partial \psi_c}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \psi_c}{\partial \xi^2} - \frac{\nu}{R} \frac{\partial \psi_c}{\partial \xi}; \quad \psi_c(\xi, 0) = \psi_c(\infty, \tau) = 0, \quad \psi_{c,\xi}(0, \tau) = f(\tau)$$

puede escribirse como

$$\frac{d^2 \bar{\psi}_c}{d\xi^2} - \frac{\nu}{R} \frac{d\bar{\psi}_c}{d\xi} - s\bar{\psi}_c = 0; \quad \bar{\psi}_{c,\xi}(\infty, s) = 0, \bar{\psi}_{c,\xi}(0, s) = \bar{f}(s)$$

La solución de la ecuación anterior es:

$$\bar{\psi}_c(\xi, s) = \bar{f}(s) \left[-\sqrt{s + \frac{\nu^2}{4R^2}} + \frac{\nu}{2R} \right]^{-1} \exp \left[- \left(\sqrt{s + \frac{\nu^2}{4R^2}} + \frac{\nu}{2R} \right) \xi \right]$$

de donde

$$\bar{\psi}_c(0, s) = \bar{f}(s) \left[-\sqrt{s + \frac{\nu^2}{4R^2}} + \frac{\nu}{2R} \right]^{-1}$$

que puede ponerse en la forma

$$\bar{f}(s) = - (s\bar{\psi}_c(0, s) - \psi_c(0, 0^+)) \left[\sqrt{s + \frac{\nu^2}{4R^2}} + \frac{\nu}{2R} \right]^{-1} - \psi_c(0, 0^+) \left[\sqrt{s + \frac{\nu^2}{4R^2}} + \frac{\nu}{2R} \right]^{-1}$$

Teniendo en cuenta que

$$\mathcal{L}^{-1} [s\bar{\psi}_c(0, s) - \psi_c(0, 0^+)] = \frac{d\psi_c(0, \tau)}{d\tau}$$

y que

$$\mathcal{L}^{-1} \left[\left(\sqrt{s + \frac{\nu^2}{4R^2}} + \frac{\nu}{2R} \right)^{-1} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} \exp \left(-\frac{\nu^2\tau}{4R^2} \right) - \frac{\nu}{2R} \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{\tau}}{2R} \right)$$

se tiene:

$$\psi_{c,\xi}(0, \tau) = - \int_0^\tau \frac{d\psi_c(0, t)}{dt} \left(\frac{\exp \left(-\frac{\nu^2(\tau-t)}{4R^2} \right)}{\sqrt{\pi(\tau-t)}} - \frac{\nu}{2R} \operatorname{erfc} \left(\nu \frac{\sqrt{\tau-t}}{2R} \right) \right) dt$$

ya que $\psi_c(0, 0^+) = 0$.

Al desarrollar en potencias de ν queda:

$$\psi_{c,\xi}(0, \tau) = - \int_0^\tau \frac{d\psi_c(0, t)}{dt} \frac{dt}{\sqrt{\pi(\tau-t)}} + \frac{\nu}{2R} \psi_c(0, \tau) + \mathcal{O}(\nu^2) \quad (2.28)$$

que constituye la ecuación integral para determinar la función $a(\tau)$. En (2.28) se observa la existencia de dos contribuciones a $\psi_{c,\xi}(0, \tau)$. Por una parte el efecto acumulativo de la variación temporal de $\psi_c(0, \tau)$ que aparece a través de la integral y, por otra, el efecto de concentración debido a la curvatura a través del segundo término. Mientras el primero favorece la difusión del calor el segundo se opone a ella.

2.5 SOLUCION DE LA ECUACION INTEGRAL. ETAPA INICIAL

Al introducir (2.25) y (2.27) en (2.28) se tiene

$$\frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} \left(1 - \nu \frac{\sqrt{\pi\tau}}{2R}\right) \left(1 - \sqrt{\lambda + a^2}\right) + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\pi}} \int_0^\tau \frac{d}{dt} \ln [F(a, \lambda)] \frac{dt}{\sqrt{\tau - t}} = \frac{\nu\varepsilon}{2R} \ln [F(a, \lambda)] + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \quad (2.29)$$

Si los términos que aparecen en (2.29) son de orden unidad y la integral está acotada esta ecuación se reduce a:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} \left(1 - \nu \frac{\sqrt{\pi\tau}}{2R}\right) \left(1 - \sqrt{\lambda + a^2}\right) = \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \quad (2.30)$$

de donde

$$a(\tau) = \sqrt{1 - \tau D \left(1 - \nu \frac{\sqrt{\pi\tau}}{2R}\right)^{-2}} + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \quad (2.31)$$

Esta expresión determina $a(\tau)$ salvo términos de orden ε y ν^2 . Es fácil verificar que las hipótesis anteriores respecto de los demás términos de (2.29) se cumplen mientras $a(\tau)$ definida por (2.31) sea de orden unidad, pero ésta deja de estar definida cuando $D\tau(1 - \nu\sqrt{\pi\tau}/2R)^{-2} > 1$.

En el instante en que se produce la ignición (que hemos fijado en $\tau = 1$) la temperatura aumenta muy rápidamente, de manera que podemos asociar la ignición con la aparición de derivadas temporales de la temperatura no acotadas. Por tanto el valor de D puede determinarse con la condición de que en $\tau = 1$ la derivada de la temperatura máxima sea infinita. El valor máximo de la temperatura es $\psi_c(0, \tau)$ definido en (2.25), pues en la zona de reacción ψ es creciente según se deduce de (2.20) y en la zona inerte es decreciente. Teniendo en cuenta (2.31), de (2.25) se obtiene $\psi_c(0, \tau) = -2\varepsilon \ln[(1 + a(\tau))/2]$ y por tanto

$$\frac{d\psi_c(0, \tau)}{d\tau} = -\frac{2\varepsilon}{1 + a(\tau)} \frac{da(\tau)}{d\tau} \quad (2.32)$$

como $a(\tau)$ es positiva para que $\psi_{c,\tau}(0, 1) = \infty$ debe ser $a_\tau(1) = \infty$, lo que a partir de (2.31) implica $a(1) = 0$, de donde

$$D = D_0 = 1 - \nu \frac{\sqrt{\pi}}{R} + \mathcal{O}(\nu^2) \quad (2.33)$$

Cerca de $\tau = 1$ la expresión para $a(\tau)$ dada por (2.31) no es correcta pues debido a la propia definición de ignición la integral de (2.28) deja de ser de orden

unidad. De hecho si se calcula usando (2.31) su valor resulta ser $\tau^{-1/2} \ln(1 - \tau) + \mathcal{O}(\nu)$ que diverge cuando $\tau \rightarrow 1$. Por tanto (2.31) sólo puede usarse para describir la evolución de la temperatura en una etapa inicial durante la cual $1 - \tau = \mathcal{O}(1)$ y $\psi_{c,\tau}(0, \tau)$, definida por (2.32), se mantenga de orden ε . En consecuencia el valor de D_o calculado en (2.33) debe considerarse como una primera aproximación al valor real.

2.6 ETAPA DE TRANSICION

La ignición ocurre durante una etapa muy corta caracterizada por $1 - \tau \ll 1$, en la cual $a(\tau)$ es muy pequeño y λ es muy próximo a 1. Para que en esa etapa los dos términos de la izquierda de (2.29) sean del mismo orden hace falta que $1 - \sqrt{\lambda + a^2}$ sea de orden ε y por tanto $a = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ y $1 - \tau = \mathcal{O}(\varepsilon)$. Los términos de la derecha de (2.29) pueden despreciarse. Conviene señalar aquí que en ambas etapas el efecto de la curvatura es despreciable debido a que la escala de la zona de reacción es demasiado pequeña, de hecho la corrección por curvatura se ha introducido a través de la solución inerte ψ_i como puede verse en (2.17). En esta segunda etapa el efecto acumulativo que aparece en (2.28) cuenta porque la temperatura está aumentando rápidamente.

Las variables apropiadas para el análisis de los instantes próximos a la ignición son: $A = a/\sqrt{\varepsilon}$ y $\tau = 1 - y\varepsilon$. Además buscamos corregir D mediante $D = D_o(1 + \delta(\varepsilon))$ con $\delta = o(1)$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$. Al introducir las nuevas variables en la ecuación integral se obtiene:

$$-\frac{\delta}{\varepsilon} - A^2 + y = 4 \int_{1/\varepsilon}^y \frac{dA(\eta)}{\sqrt{\eta - y}} + \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}, \varepsilon) \quad (2.34)$$

Cuando y es grande comparado con la unidad pero pequeño comparado con $1/\varepsilon$ de manera que $1 - \varepsilon y = \mathcal{O}(1)$ el comportamiento de $A(\eta)$ debe ser $A(\eta) \sim \sqrt{\eta - \delta/\varepsilon}$. Al tratar de verificar la ecuación (2.34) con esta aproximación para $A(\eta)$ se encuentra que la integral tiene una divergencia del tipo $\ln \sqrt{(\varepsilon y - \delta)/4}$, que corresponde a la encontrada al final del análisis de la etapa inicial. Para resolver (2.34) es necesario eliminar la anterior divergencia logarítmica, lo que puede hacerse mediante la identidad:

$$2\sqrt{\tau} \int_0^\tau \frac{dt}{dt} (\sqrt{1-t}) \frac{dt}{(1 + \sqrt{1-t}) \sqrt{\tau - t}} = \ln(1 - \tau) \quad (2.35)$$

que multiplicada por $-\varepsilon/\sqrt{\pi\tau}$ y sumando a (2.29) proporciona:

$$\left(1 - \sqrt{\lambda + a^2}\right) \left(1 - \nu \frac{\sqrt{\pi\tau}}{2R}\right) - \varepsilon \ln(1 - \tau) = -\varepsilon \sqrt{\tau} I(\tau) + \mathcal{O}(\varepsilon, \varepsilon\nu, \nu^2) \quad (2.36)$$

donde $I(\tau)$ es:

$$I(\tau) = \int_0^\tau \left\{ \frac{d}{dt} \ln [F(a, \lambda)] - \frac{1}{\sqrt{1-t}(1+\sqrt{1-t})} \right\} \frac{dt}{\sqrt{\tau-t}} \quad (2.37)$$

Para calcular $I(\tau)$ descomponemos la integral en dos: I_1 desde $t = 0$ a $t = 1 - k\varepsilon$ con $1 \ll k \ll \varepsilon^{-1}$ e I_2 desde $t = 1 - k\varepsilon$ a $t = \tau$. La primera integral puede calcularse usando para $a(\tau)$ la expresión (2.31) pues $1 - \tau = \mathcal{O}(1)$. Mediante los desarrollos

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{1-\tau} + \mathcal{O}(\delta, \varepsilon, \nu^2) \\ \lambda &= \tau + \mathcal{O}(\delta, \nu^2) \end{aligned} \quad (2.38)$$

puede demostrarse que

$$\frac{d}{dt} \ln [F(a, \lambda)] = \frac{1}{\sqrt{1-t}(1+\sqrt{1-t})} + \mathcal{O}(\delta, \varepsilon, \nu^2) \quad (2.39)$$

con lo cual la primera integral es:

$$I_1 = \mathcal{O}(\delta, \varepsilon, \nu^2) \quad (2.40)$$

En la segunda integral $1 - \tau \ll 1$ y, por tanto, usamos las variables $a = \sqrt{\varepsilon}A$, $1 - \varepsilon y = \tau$ y $1 - \varepsilon \eta = t$, con lo cual puede escribirse

$$I_2 = \int_k^y \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \frac{d}{d\eta} \ln F + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\eta}(1+\sqrt{\varepsilon\eta})} \right\} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\eta-y}} d\eta \quad (2.41)$$

La función F en las nuevas variables admite el siguiente desarrollo:

$$F = 4(1 - 2\sqrt{\varepsilon}A) + \mathcal{O}(\delta, \varepsilon, \nu) \quad (2.42)$$

que llevado a (2.41) da:

$$I_2 = - \int_y^k \left(\frac{1}{\sqrt{\eta}} - 2 \frac{dA}{d\eta} \right) \frac{d\eta}{\sqrt{\eta-y}} + \mathcal{O}(\delta/\sqrt{\varepsilon}, \sqrt{\varepsilon}, \nu/\sqrt{\varepsilon}) \quad (2.43)$$

y sustituyendo en (2.36) las expresiones (2.40), (2.43) y las correspondientes a a , τ y D se obtiene:

$$-\frac{1}{2}(\delta - \varepsilon y + \varepsilon A^2) - \varepsilon \ln \varepsilon y = -\varepsilon [\mathcal{O}(\delta, \nu^2, \varepsilon) + I_2] + \mathcal{O}(\varepsilon, \nu^2) \quad (2.44)$$

es decir:

$$\begin{aligned}
 -\delta + \varepsilon y - \varepsilon A^2 - 2\varepsilon \ln(\varepsilon y) = 2\varepsilon \int_y^k \left(\frac{1}{\sqrt{\eta}} - 2 \frac{dA}{d\eta} \right) \frac{d\eta}{\sqrt{\eta - y}} + \\
 \underbrace{\mathcal{O}(\varepsilon\delta, \varepsilon\nu^2, \varepsilon^2)}_{I_1} + \underbrace{\mathcal{O}(\delta\sqrt{\varepsilon}, \varepsilon\sqrt{\varepsilon}, \nu\sqrt{\varepsilon})}_{I_2} + \underbrace{\mathcal{O}(\varepsilon, \varepsilon\nu, \nu^2)}_{(2.36)} \quad (2.45)
 \end{aligned}$$

Esta ecuación contiene términos no explícitos de diversos órdenes de magnitud. El primer grupo proviene de la integral I_1 (2.40), el segundo de I_2 (2.43) y el tercero aparece ya en (2.36). Los términos de este último están asociados, respectivamente, a la corrección de la cinética de Frank-Kamenetskii (ε), al efecto de la curvatura sobre la condición de acoplamiento entre la zona de reacción y la de conducción no estacionaria ($\varepsilon\nu$), y al siguiente orden del desarrollo de la solución inerte en potencias de ν (ν^2). Los términos dominantes del conjunto son los de orden ε y $\nu\sqrt{\varepsilon}$, asociado éste al efecto de la curvatura sobre el valor de I_2 .

La ecuación (2.45) permite determinar δ y la función A y, por tanto, el tiempo de ignición que se obtiene al incluir los efectos no estacionarios y la evolución de la temperatura en la etapa de transición. Para que la estructura de la zona de reacción está libre de los efectos de la curvatura es necesario que $\nu\sqrt{\varepsilon}$ sea despreciable frente a ε . Teniendo en cuenta que habíamos encontrado previamente $\nu \gg \varepsilon$, el orden de ν apropiado para que la curvatura, en primera aproximación, inter venga sólo en la distribución inerte es $\varepsilon \ll \nu \ll \sqrt{\varepsilon}$. En esta hipótesis al escribir explícitamente los términos de orden ε y omitir el resto se obtiene:

$$-\frac{\delta}{\varepsilon} + y - A^2 - 2\ln(\varepsilon y) + 2\alpha = 2 \int_y^k \left(\frac{1}{\sqrt{\eta}} - 2 \frac{dA}{d\eta} \right) \frac{d\eta}{\sqrt{\eta - y}} \quad (2.46)$$

que es la misma ecuación determinada por Liñán y Williams en [LW3]. Las consideraciones hechas allí mostraban la convergencia de la integral. Para que (2.46) se verifique es necesario que

$$\delta = -2\varepsilon \ln \varepsilon + 2\alpha\varepsilon + b\varepsilon \quad (2.47)$$

siendo b una constante de orden unidad a determinar con la condición de que la ecuación integral para A :

$$y - A^2 - 2\ln y - b = 2 \int_y^k \left(\frac{1}{\sqrt{\eta}} - 2 \frac{dA}{d\eta} \right) \frac{d\eta}{\sqrt{\eta - y}} \quad (2.48)$$

tenga una solución divergente en el instante de ignición, es decir, en $y = 0$. Esta ecuación, que debe integrarse con la condición $A \rightarrow \sqrt{y}$ cuando $y \rightarrow \infty$, aparecerá posteriormente en el capítulo 6 en uno de cuyos apéndices (A.6.1) se describe su integración

numérica. El valor de b apropiado resulta ser $b = 5.123 \dots$. De esta forma el factor D que mide el tiempo de ignición puede ponerse como:

$$D = 1 - \nu \frac{\sqrt{\pi}}{R} - 2\varepsilon \ln \varepsilon + 2\alpha\varepsilon + b\varepsilon \quad (2.49)$$

2.7 EXPRESION DEL TIEMPO DE IGNICION

Una vez determinado D , el tiempo de ignición en variables físicas puede expresarse como:

$$t_{ig} = \frac{Dc_p(T_s - T_o)}{2\pi\varepsilon q B e^{-E/RT_s}} \quad (2.50)$$

con

$$\begin{aligned} \varepsilon &= RT_s^2 / E(T_s - T_o) \\ D &= 1 - \nu \frac{\sqrt{\pi}}{R} - 2\varepsilon \ln \varepsilon + (2\alpha + b)\varepsilon \\ R &= \tilde{\rho} / \ell \end{aligned}$$

siendo $\tilde{\rho}$ el radio de curvatura local en el caso de un sólido bidimensional o el radio de curvatura medio ($1/\tilde{\rho} = 1/\tilde{\rho}_1 + 1/\tilde{\rho}_2$, donde $\tilde{\rho}_1$ y $\tilde{\rho}_2$ son los radios principales de curvatura) en el caso tridimensional.

El parámetro ν , que interviene en todo el análisis asociado a la curvatura es, en definitiva, un número de Damköhler modificado que puede expresarse como

$$\nu = \sqrt{\frac{D}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\lambda RT_s^2}{\ell^2 \rho q B E e^{-E/RT_s}}} = \sqrt{\frac{D}{2\pi}} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon^2 D_a}} \quad (2.51)$$

con lo cual la condición para que el efecto de la curvatura sea considerado como una corrección ($\nu \lesssim \sqrt{\varepsilon}$) es

$$\sqrt{\varepsilon^3 D_a} \gtrsim 1.$$

Es fácil comprobar que el tiempo característico definido en el proceso de adimensionalización mediante la relación (2.2) es, para $D = 1$, el cociente entre el tiempo de conducción $\rho c_p \ell^2 / \lambda$ y $2\pi \varepsilon^2 D_a$:

$$t_c = \frac{t_\alpha}{2\pi \varepsilon^2 D_a}$$

Por tanto una forma equivalente de (2.50) es

$$\frac{t_{ig}}{t_\alpha} = \frac{D}{2\pi \varepsilon^2 D_a} \ll 1 \quad (2.52)$$

El valor de D se obtiene considerando que, una vez expresado ν mediante (2.51), la relación (2.49) es una ecuación para D :

$$D = 1 - \sqrt{D} \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon^2 D_a}} \frac{1}{R} - 2\varepsilon \ln \varepsilon + (2\alpha + b)\varepsilon$$

cuya solución, al menor orden, es

$$D = 1 - 2\varepsilon \ln \varepsilon + (2\alpha + b)\varepsilon - \frac{1}{R} \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon^2 D_a}}$$

con lo cual (2.52) pasa a ser:

$$\frac{t_{ig}}{t_\alpha} = \frac{1}{2\pi\varepsilon^2 D_a} \left(1 - 2\varepsilon \ln \varepsilon + (2\alpha + b)\varepsilon - \frac{\sqrt{\pi}/R}{\sqrt{2\pi\varepsilon^2 D_a}} + \mathcal{O}(\varepsilon) \right) \ll 1. \quad (2.53)$$

Si, como es usual, referimos el tiempo de ignición al tiempo químico $t_q = t_\alpha/D_a$, la relación entre t_{ig} y t_q es:

$$\frac{t_{ig}}{t_q} = \frac{1}{2\pi\varepsilon^2} \left(1 - 2\varepsilon \ln \varepsilon + (2\alpha + b)\varepsilon - \frac{\sqrt{\pi}/R}{\sqrt{2\pi\varepsilon^2 D_a}} + \mathcal{O}(\varepsilon) \right) \gg 1.$$

CAPITULO 3

IGNICION EN UNA ESQUINA

3.1 INTRODUCCION

En el capítulo anterior hemos analizado el efecto de la curvatura sobre el tiempo de ignición bajo las hipótesis siguientes: a) la longitud característica del sólido, ℓ , es mucho mayor que la longitud característica asociada a la conducción, y b) el radio de curvatura de la superficie en la escala física es, en todos los puntos, de orden unidad y, en virtud de a), al referirlo a la escala asociada a la conducción resulta ser mucho mayor que la unidad.

La primera hipótesis ($\ell_c/\ell = \nu \ll 1$) implica que en el intervalo de tiempo en el que tiene lugar la ignición la onda térmica generada por el aumento de temperatura en el contorno penetra en el sólido una distancia pequeña comparada con su tamaño, de forma que aquél aparece como infinito. Esto constituye una simplificación importante al resolver la ecuación de la conducción del calor para calcular la solución inerte.

Como consecuencia de la segunda hipótesis ($R = \mathcal{O}(1)$) la temperatura inerte está determinada en primera aproximación por un problema unidimensional donde la curvatura aparece como una corrección proporcional a ν . La ecuación que describe la evolución de la temperatura en la zona de reacción es la misma que en el caso plano a excepción de la dependencia de la temperatura inerte respecto de la curvatura. En consecuencia tanto el tiempo de ignición como la distribución de temperatura conservan el orden de magnitud aunque dependen, de forma paramétrica a través de la curvatura, de la posición sobre la superficie.

Este análisis no es válido en aquellos puntos donde la curvatura no sea de orden unidad, pues en este caso su efecto se nota a distancias más cortas cuanto menor es el radio de curvatura. Así cuando $R = \mathcal{O}(\nu)$ todos los términos de la ecuación de conducción inerte (2.11) son del mismo orden de magnitud de manera que la distribución

inerte de temperatura no puede considerarse unidimensional. Sin embargo en la ecuación correspondiente a la zona de reacción, que suponemos muy delgada frente al espesor de la capa de conducción, no es necesario todavía retener derivadas espaciales que contengan el efecto de la curvatura. Para que esto ocurra debe verificarse $R = \mathcal{O}(\nu\epsilon)$ en cuyo caso no sólo la capa de conducción nota el efecto de la curvatura sino que éste llega hasta la zona de reacción. La situación límite corresponde a que exista algún punto singular en la superficie en el cual la curvatura sea infinita, esto puede identificarse con la presencia de una arista en un sólido suficientemente largo o un vértice en un sólido tridimensional.

En este capítulo analizaremos el proceso de ignición de un sólido cuya superficie tiene una arista determinada por dos planos perpendiculares entre sí. Si se verifica la hipótesis a) este sólido puede modelarse mediante un sólido bidimensional semiinfinito que, en un sistema de referencia cartesiano, ocupe el primer cuadrante. La generalización de este análisis al caso en que los planos no son perpendiculares se realizará en el capítulo siguiente.

En el procedimiento que emplearemos subyacen las mismas ideas del capítulo anterior. Las dos principales diferencias que se encuentran en el transcurso del análisis y que ahora anticipamos son: 1) la ecuación de la zona de reacción se reduce a un problema que presenta cierta analogía con el de Frank-Kamenetskii y que necesariamente debe resolverse de forma numérica, pero que al estar libre de parámetros constituye un problema universal, y 2) el calor generado por la reacción química no afecta a la zona de conducción no estacionaria, situada a continuación de la zona de reacción, debido al efecto geométrico que reduce el flujo de calor conforme aumenta la distancia al origen.

3.2 FORMULACION Y ADIMENSIONALIZACION

El modelo matemático que describe la conducción de calor en un sólido reactivo bidimensional determinado por $\tilde{r} \geq 0$ y $0 < \theta < \pi/2$ cuya temperatura superficial aumenta en el instante inicial y se mantiene constante en los instantes posteriores es:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left[\frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left(\tilde{r} \frac{\partial T}{\partial \tilde{r}} \right) + \frac{1}{\tilde{r}^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} \right] + \rho q B e^{-E/RT} \quad (3.1a)$$

$$T(r, \theta, 0) = T_o \quad (3.1b)$$

$$T(r, 0, t) = T(r, \pi/2, t) = T_s, \quad T_r(\infty, \theta, t) = 0 \quad (3.1c)$$

donde (r, θ) representan coordenadas polares.

Las razones para imponer como condición de contorno en el infinito que el flujo de calor sea nulo en lugar de que la temperatura sea nula son análogas a las expuestas en el capítulo 2.

Las propiedades físicas del sólido representadas por ρ (densidad), c_p (calor específico) y λ (conductividad térmica) se suponen constantes e independientes de la temperatura. La reacción química ha sido modelada mediante una reacción global irreversible de tipo Arrhenius de orden cero con factor pre-exponencial B , energía de activación E y calor de reacción q constantes. Este último se supone suficientemente grande como para poder despreciar, en el intervalo de tiempo en que se produce la ignición, el consumo de reactante, cuyo efecto será analizado en el capítulo 6. Las temperaturas inicial y superficial verifican $T_s > T_o > 0$. Desde el punto de vista del análisis asintótico haremos la hipótesis usual de energía de activación alta o, más exactamente, $E/RT_s \gg 1$.

Para adimensionalizar las ecuaciones tomamos como variables características

$$t_c = \frac{\alpha c_p T_s}{\pi q B e^{-E/RT_s}} \quad (3.2)$$

$$r_c = \left[\frac{\alpha \lambda T_s}{\pi \rho q B e^{-E/RT_s}} \right]^{1/2} = \left[\frac{\lambda}{\rho c_p} t_c \right]^{1/2}$$

donde α es un parámetro adimensional de orden unidad definido por $\alpha = (T_s - T_o)/T_s$. Aparece otro parámetro adimensional relacionado con la energía de activación definido mediante $\varepsilon = RT_s/E\alpha$ y que consideraremos mucho menor que la unidad.

Las variables adimensionales se definen como: $\tau = t/t_c$, $r = \tilde{r}/r_c$ y $\varphi = (T - T_o)/(T_s - T_o)$ con lo que las ecuaciones y condiciones de contorno adoptan la forma:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\pi} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad (3.3a)$$

$$\varphi(r, \theta, 0) = 0 \quad (3.3b)$$

$$\varphi_r(\infty, \theta, \tau) = \varphi_\theta(r, \pi/4, \tau) = 0, \quad \varphi(r, 0, \tau) = 1 \quad (3.3c)$$

El operador de Laplace será designado en lo que sigue mediante Δ independientemente de las coordenadas espaciales que en cada caso se utilicen. Por razones de simetría la condición $\varphi(r, \pi/2, \tau) = 1$ se ha reemplazado por $\varphi_\theta(r, \pi/4, \tau) = 0$, de forma que el dominio de integración pasa a ser $r > 0$, $0 < \theta < \pi/4$.

3.3 SOLUCION INERTE

Si el sólido no fuese reactivo la distribución de temperatura en su interior estaría determinada por el problema (3.3) sin término de reacción. La misma ecuación es aplicable cuando $\varphi - 1 = \mathcal{O}(1)$, es decir, cuando la reacción está congelada. Sin embargo en ese caso puede ser necesaria una modificación de las condiciones de contorno e iniciales como ocurrió en el capítulo previo. La distribución de temperatura inerte, φ_i , es por tanto solución de:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial \tau} = \Delta \varphi_i \quad (3.4a)$$

$$\varphi_i(r, \theta, 0) = 0 \quad (3.4b)$$

$$\frac{\partial \varphi_i(\infty, \theta, \tau)}{\partial r} = \frac{\partial \varphi_i(r, \pi/4, \tau)}{\partial \theta} = 0, \quad \varphi_i(r, 0, \tau) = 1 \quad (3.4c)$$

Esta puede calcularse mediante varios métodos, por ejemplo, observar que (3.4) admite solución de semejanza a través de la variable $r/\sqrt{\tau}$ y resolver el problema de contorno mediante separación de variables, o bien emplear la función de Gréen apropiada. En [CJ, p.464] se ha resuelto (3.4) utilizando la transformada de Fourier-Hankel y la solución que se obtiene es:

$$\varphi_i = 1 - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{8}{\pi} \sin 2(2k+1)\theta \int_0^{\infty} e^{-s^2 \tau} J_{2(2k+1)}(sr) \frac{ds}{s} \quad (3.4d)$$

siendo $J_\nu(x)$ las funciones de Bessel de primera especie. Esta expresión es apropiada cuando se emplean coordenadas polares y además es fácilmente generalizable cuando el ángulo no es $\pi/2$. El problema (3.4) en coordenadas cartesianas puede formularse como:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial y^2} \quad (3.5a)$$

$$\varphi_i(x, y, 0) = 0 \quad (3.5b)$$

$$\varphi_i(0, y, \tau) = \varphi_i(x, 0, \tau) = \varphi_{i,x}(\infty, y, \tau) = \varphi_{i,y}(x, \infty, \tau) = 0 \quad (3.5c)$$

cuya solución, como puede comprobarse, es

$$\varphi_i = 1 - \operatorname{erf}(x/2\sqrt{\tau}) \operatorname{erf}(y/2\sqrt{\tau}) \quad (3.5d)$$

La idea intuitiva de que la presencia de la arista reduce el tiempo de ignición puede justificarse si se analiza el distinto comportamiento de las soluciones inertes correspondientes al caso uni y bidimensional, $\varphi_{i,1}$ y $\varphi_{i,2}$. En ambos la distribución inerte de

temperatura es solución de la ecuación asociada a la conducción no estacionaria del calor: $\partial\varphi/\partial\tau = \Delta\varphi$. Si se utilizan coordenadas cartesianas ambas soluciones pueden escribirse de forma compacta mediante la función error $\varphi_{i,1} = 1 - \text{erf}(\xi)$ y $\varphi_{i,2} = 1 - \text{erf}(\xi)\text{erf}(\eta)$ donde $(\xi, \eta) = (x/2\sqrt{\tau}, y/2\sqrt{\tau})$.

Considerando puntos próximos a la superficie en el caso unidimensional ($\xi \ll 1$) y además alejados de la esquina en el bidimensional ($\xi \ll 1, \eta = \mathcal{O}(1)$), a partir del desarrollo en serie de la función $\text{erf}(x)$ [AB, p.297] encontramos los siguientes comportamientos para $\varphi_{i,1}$ y $\varphi_{i,2}$:

$$\varphi_{i,1} \sim 1 - 2\xi/\sqrt{\pi}$$

$$\varphi_{i,2} \sim 1 - 2\xi\text{erf}(\eta)/\sqrt{\pi}$$

siendo $\text{erf}(\eta) = \mathcal{O}(1)$. En los dos casos la temperatura cerca de la pared decae linealmente y el gradiente es de orden unidad. Sin embargo en los puntos próximos a la esquina ($\xi \ll 1, \eta \ll 1$) el comportamiento de $\varphi_{i,2}$ es

$$\varphi_{i,2} \sim 1 - 4\xi\eta/\pi$$

de manera que los gradientes de temperatura son muy pequeños frente a los que aparecen tanto en el caso unidimensional como en el bidimensional cuando ξ ó η son de orden unidad.

Existe, por tanto, una región pequeña próxima a la esquina donde la temperatura inerte es aproximadamente constante e igual a la impuesta en la superficie exterior. El efecto de la esquina es, en definitiva, permitir que la condición de contorno penetre en el sólido generando una región de temperatura uniforme, a diferencia del caso unidimensional en que la temperatura decae rápidamente. En esta zona de temperatura inerte casi constante la velocidad de reacción es mucho mayor que en el resto del sólido y es donde debemos esperar que se produzca el "runaway". Además el tiempo necesario para ello debe ser sensiblemente menor que en el caso unidimensional. De hecho, según se desprende de la estimación de órdenes de magnitud realizada en el capítulo 1, el orden de magnitud del tiempo bidimensional es ε veces el unidimensional.

Si definimos una nueva variable dependiente $\tilde{\psi}$ mediante $\tilde{\psi} = \varphi - \varphi_i$ el

problema (3.3) pasa a ser

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tau} = \Delta \tilde{\psi} + \frac{1}{\pi} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\tilde{\psi} + \varphi_i - 1}{1 + \alpha(\tilde{\psi} + \varphi_i - 1)} \right] \quad (3.6a)$$

$$\tilde{\psi}(r, \theta, 0) = 0 \quad (3.6b)$$

$$\tilde{\psi}_r(\infty, \theta, \tau) = \tilde{\psi}_\theta(r, \pi/4, \tau) = \tilde{\psi}(r, 0, \tau) = 0, \quad (3.6c)$$

3.4 ZONA DE REACCION

De la estructura del término de reacción en (3.6a) y de las condiciones (3.6b) y (3.6c) se deduce que éste sólo interviene cuando $\varphi_i - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$, es decir, en regiones muy próximas a la superficie ($r \ll 1$) donde la temperatura difiere muy poco de la del contorno.

Si escribimos φ_i dada por (3.4d) o (3.5d) para valores pequeños de r ($r = \sqrt{x^2 + y^2}$) haciendo uso del desarrollo en serie de $J_\nu(x)$ [AB, p.360] ó de $\text{erf}(x)$ [AB, p.297], obtenemos un desarrollo para φ_i cuyos dos primeros términos, expresados en coordenadas polares, son

$$\varphi_i \simeq 1 - \frac{1}{\pi} \frac{r^2}{2\tau} \text{sen} 2\theta + \frac{1}{24\pi} \frac{r^4}{\tau^2} \text{sen} 2\theta + \dots$$

Por tanto la zona de reacción puede definirse por la condición $r^2/\tau = \mathcal{O}(\varepsilon)$, lo que sugiere emplear $\tilde{\xi} = r/\sqrt{\tau}$ como variable espacial, con lo cual el problema (3.6) se escribe de la forma:

$$\tau \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tau} - \frac{1}{2} \tilde{\xi} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{\xi}} = \Delta \tilde{\psi} + \frac{\tau}{\pi} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\tilde{\psi} + \varphi_i - 1}{1 + \alpha(\tilde{\psi} + \varphi_i - 1)} \right] \quad (3.7a)$$

$$\tilde{\psi}(\tilde{\xi}, \theta, 0) = 0 \quad (3.7b)$$

$$\tilde{\psi}_{\tilde{\xi}}(\infty, \theta, \tau) = \tilde{\psi}_\theta(\tilde{\xi}, \pi/4, \tau) = \tilde{\psi}(\tilde{\xi}, 0, \tau) = 0, \quad (3.7c)$$

Empleando el desarrollo anterior para φ_i el término de reacción puede escribirse como:

$$\frac{\tau}{\pi} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\tilde{\psi} - \frac{1}{2\pi} \tilde{\xi}^2 \text{sen} 2\theta + \frac{1}{24\pi} \tilde{\xi}^4 \text{sen} 2\theta + \dots}{1 + \alpha \left(\frac{1}{2\pi} \tilde{\xi}^2 \text{sen} 2\theta - \frac{1}{24\pi} \tilde{\xi}^4 \text{sen} 2\theta + \dots \right)} \right] \quad (3.8)$$

de donde deducimos que en la zona de reacción $\tilde{\psi}$ debe ser de orden ε y $\tilde{\xi}$ de orden $\sqrt{\varepsilon}$. Haciendo $\tilde{\psi} = \varepsilon\psi$ y $\tilde{\xi} = \sqrt{\pi\varepsilon}\xi$ obtenemos:

$$\pi\varepsilon \left[\frac{\partial\psi}{\partial\tau} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial\psi}{\partial\xi} \right] = \Delta\psi + \tau \exp \left[\frac{\psi - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta + \frac{\pi}{24}\varepsilon\xi^4 \sin 2\theta + o(\varepsilon)}{1 + \alpha\varepsilon \left(\psi - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta \right) + o(\varepsilon)} \right] \quad (3.9a)$$

$$\psi(\xi, \theta, 0) = 0 \quad (3.9b)$$

$$\psi_\xi(\infty, \theta, \tau) = \psi_\theta(\xi, \pi/4, \tau) = \psi(\xi, 0, \tau) = 0 \quad (3.9c)$$

El primer término de un desarrollo de ψ en serie de potencias de ε o, lo que es equivalente, la función ψ en el límite de energías de activación infinitas es solución de:

$$\Delta\psi + \tau \exp \left[\psi - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta \right] = 0 \quad (3.10a)$$

$$\psi(\xi, 0) = \psi_\theta(\xi, \pi/4) = \psi_\xi(\infty, \theta) = 0 \quad (3.10b)$$

La ecuación anterior muestra que, en la variable $\xi = r/\sqrt{\pi\varepsilon\tau}$, la evolución de la temperatura en la zona de reacción es cuasiestacionaria.

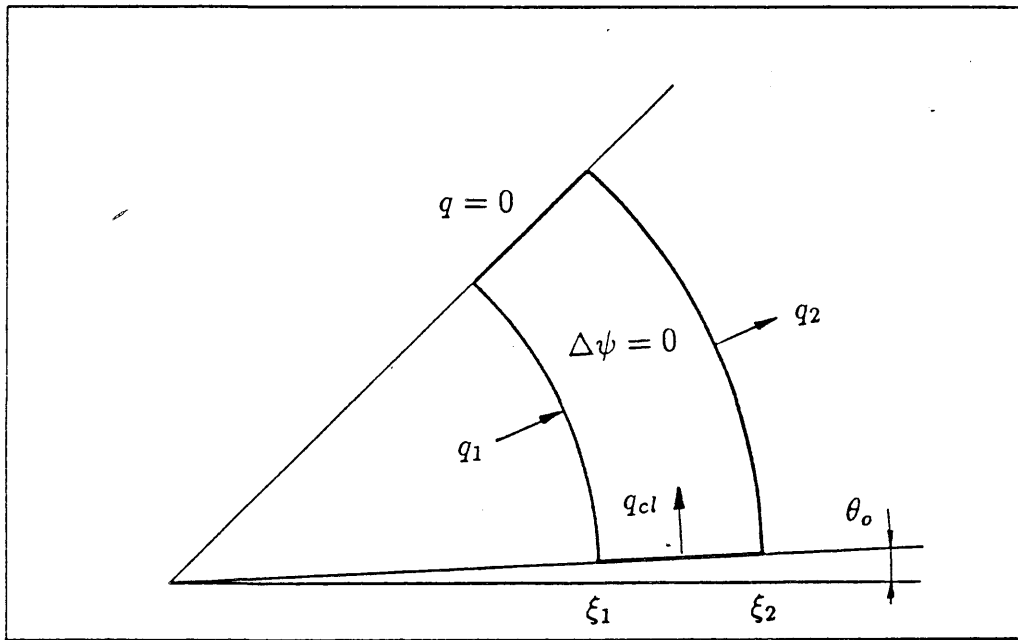


Figura 3.1 Flujos de calor en la región $\xi \gg 1$.

La condición de contorno en el infinito debería haberse deducido del acoplamiento entre las soluciones correspondientes a la zona de reacción y a la región exterior donde la reacción química está congelada. Sin embargo es posible justificar que $\psi_\xi(\infty, \theta) = 0$ es la condición de contorno adecuada. Para ello obsérvese que cuando

$\xi \gg 1$ la ecuación (3.10) se reduce a la de Laplace excepto en una capa límite próxima a $\theta = 0$ donde $\xi^2\theta = \mathcal{O}(1)$. Como veremos más adelante en esta capa se verifica $\psi = \mathcal{O}(\tau/\xi^2)$ y en consecuencia $\psi_\xi(\infty, \theta) = 0$ cuando $\theta \ll 1$. Consideremos la región definida por $1 \ll \xi_1 < \xi < \xi_2$ y $\theta_0 < \theta < \pi/4$ con $\theta_0 = \mathcal{O}(1/\xi_1)$ en la cual $\Delta\psi = 0$. Aplicando el teorema de Gauss encontramos que el flujo total de calor es nulo. Como en $\theta = \pi/4$ también es nulo y en $\theta = \theta_0$ es positivo, pues en la capa límite la temperatura es creciente, q_2 es menor que q_1 , es decir $|\psi_\xi(\xi_2)| < q_1/\xi_2$ de manera que $\psi_\xi(\infty, \theta) = 0$. Esta condición es, en definitiva, consecuencia del efecto geométrico asociado a la presencia de la esquina.

En el apéndice 3.1 se demuestra que el problema (3.10) tiene solución si τ , que actúa como un parámetro, es suficientemente pequeño y carece de ella si τ es suficientemente grande. El esquema numérico que emplearemos para resolver (3.10) permitirá determinar el valor máximo de τ , τ_{lim} , para el cual (3.10) admite solución y además mostrará la existencia de al menos dos soluciones si $\tau < \tau_{lim}$. Este valor máximo representa un límite inferior del instante en que produce la ignición. En $\tau = \tau_{lim}$ la derivada temporal deja de estar acotada, y en consecuencia la descripción cuasiestacionaria de la zona de reacción falla cuando $\psi_\tau = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$, lo que ocurre antes de llegar a τ_{lim} . Nótese que en (3.10) el tiempo adimensional, $\tau = t/t_c$, desempeña el mismo papel que el número de Damköhler en el problema de Frank-Kamenetskii.

3.4.1 Solución del problema (3.10) para $t \ll 1$

Considerando valores de $\tau \ll 1$ obtendremos la solución de (3.10) en instantes próximos al inicial cuando la temperatura ψ en todo el sólido no difiere sustancialmente de cero. Esta solución servirá de punto de partida en el esquema numérico para resolver (3.10) y además ilustrará alguna de las características de su solución, en particular el comportamiento cuando $r \rightarrow 0$ y cuando $r \rightarrow \infty$.

Cuando $\tau \ll 1$ ψ puede buscarse como un desarrollo de la forma $\psi = \tau u_1 + \tau^2 u_2 + \dots$, siendo $u_i = u_i(\xi, \theta)$, que llevado a (3.10) permite obtener los distintos problemas lineales para calcular u_i . Para el primer término se tiene:

$$\Delta u_1 + \exp(-\xi^2 \sin 2\theta/2) = 0 \quad (3.11a)$$

$$u_{1,\xi}(\infty, \theta) = u_1(\xi, 0) = u_{1,\theta}(\xi, \pi/4) = 0 \quad (3.11b)$$

En el apéndice 3.2 se dan los detalles acerca de la solución de (3.11) mediante separación de variables, expresando $u_1(\xi, \theta)$ como una serie de la forma $u_1(\xi, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(\xi) \omega_n(\theta)$ siendo $\omega_n(\theta) = \sqrt{8/\pi} \sin 2(2n-1)\theta$. Aunque no es posible obtener de forma analítica una representación completa de la solución encontramos las siguientes características:

- a) En $\xi \rightarrow 0$ el primer armónico posee una singularidad del tipo $\xi^2 \ln \xi$ mientras que los demás armónicos son regulares en primera aproximación. Las expresiones correspondientes son:

$$\begin{aligned} f_1(\xi) &= b_0 \xi^2 + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \xi^2 \ln(1/\xi) + o(\xi^2) \\ f_n(\xi) &= 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\lambda_n(\lambda_n^2 - 4)} \xi^2 + o(\xi^2) \quad (n \geq 2) \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde $\lambda_n = 2(2n-1)$ y $b_0 = .092034 \dots$. Esta singularidad es típica de la ecuación $\Delta u = -1$ y aparece como consecuencia de discontinuidades en las condiciones de contorno o de cambios bruscos en la forma del mismo tales como una esquina [BL, p.43]. Ya que cerca del origen el problema (3.11) puede escribirse como $\Delta \psi \simeq -\tau$, su solución en términos de u_1 también tendrá una singularidad de este tipo. Boyd [BO] señala que el efecto de la misma es muy débil y que sólo sería necesario tenerlo en cuenta en el caso de que deseásemos obtener gran precisión en la solución del problema. Dado que el esquema numérico que emplearemos utiliza diferencias finitas de segundo orden ignoraremos su efecto.

- b) En $\xi \rightarrow \infty$ encontramos que el primer armónico decae como $\ln \xi / \xi^2$ mientras que los restantes lo hacen en primera aproximación, como $1/\xi^2$:

$$\begin{aligned} f_1(\xi \rightarrow \infty) &= b_\infty \frac{1}{\xi^2} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\ln \xi}{\xi^2} + o(\xi^{-2}) \\ f_n(\xi \rightarrow \infty) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\lambda_n}{\lambda_n^2 - 4} \frac{1}{\xi^2} + o(\xi^{-2}) \quad (n \geq 2) \end{aligned} \quad (3.13)$$

con $b_\infty = .03085 \dots$. Según veremos más adelante la solución de (3.10) presentará un decaimiento análogo pues para $\xi \rightarrow \infty$ y ψ acotada el problema se comporta como (3.11) ya que $\exp(\psi - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta) \simeq \exp(-\frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta)$.

3.4.2 Solución de (3.10) para $\tau = \mathcal{O}(1)$

El problema de autovalores, no lineal y bidimensional (3.10) posee cierta semejanza con el problema de Frank-Kamenetskii, denominado de Bratu en otros contextos, $\Delta u + \lambda e^u = 0$ definido en el interior del cuadrado de lado unidad con condiciones de Dirichlet homogéneas. Su solución es bien conocida y las técnicas empleadas para calcularla puede servir de guía para abordar la solución de (3.10). Existen dos diferencias básicas entre ambos, asociadas a la diferente estructura del término no lineal y a la no acotación del dominio.

El término no lineal depende tanto de ψ como de las variables espaciales ξ y θ lo que tiene una doble consecuencia. Cuando ξ es muy grande éste es exponencialmente pequeño y la ecuación se reduce a la de Laplace, que representa la conducción estacionaria de calor. Sin embargo existe siempre una capa muy delgada donde $\xi^2 \sin 2\theta = \mathcal{O}(1)$ en la cual no es posible desprestigiar el término de reacción. El efecto de esta capa límite es, como vemos a continuación, provocar un salto de temperatura en $\theta \sim 0$ y $\xi \gg 1$. Por tanto la contrapartida de simplificar la ecuación (3.10) y reducirla a la de Laplace es modificar las condiciones de contorno en $\theta = 0$ de manera que la temperatura deja de ser nula, estando determinada por el salto asociado a la capa límite.

Al tratarse de un dominio no acotado se presenta la dificultad de cómo imponer en el esquema numérico las condiciones de contorno en $\xi = \infty$. Es evidente que éstas deben imponerse en un punto ξ_∞ suficientemente grande pero necesariamente finito. Por otra parte la condición en ξ_∞ no puede ser el resultado de trasladar desde $\xi = \infty$ a ξ_∞ la condición $\psi_\xi = 0$. De hacerlo así estaríamos suponiendo que el sólido está aislado en ξ_∞ , impidiendo, por tanto, que el flujo de calor alcance regiones cada vez más amplias (hecho que como hemos visto constituye una diferencia fundamental entre el problema unidimensional y el bidimensional) lo que originaría una acumulación de calor donde la reacción está congelada y además estaríamos desprestigiar el calor generado por la reacción química en la capa límite situada en $\xi > \xi_\infty$. Por tanto en ξ_∞ debemos imponer una condición distinta de $\psi_\xi(\infty, \theta) = 0$ pero que sea consecuencia de ésta.

Cuando se emplean métodos de "shooting" en ecuaciones diferenciales ordinarias y el intervalo de integración no está acotado un procedimiento eficaz para im-

poner correctamente la condición de contorno en $|x| = \infty$ es resolver de forma analítica la ecuación simplificada en $|x| \gg 1$, con la condición de contorno apropiada en $|x| = \infty$ y deducir una relación entre el valor de la función y sus derivadas en un punto x_∞ tal que $1 \ll |x_\infty| < \infty$. Esta relación pasa a desempeñar el papel de condición de contorno a imponer en x_∞ sustituyendo a la condición previa en $|x| = \infty$. El método aprovecha la posibilidad de construir un desarrollo asintótico de la solución cuando $|x| \gg 1$ para trasladar la condición de contorno en $|x| = \infty$ a $x = x_\infty$.

Esta misma idea puede aplicarse en nuestro caso aunque de una forma diferente. El procedimiento que emplearemos para resolver el problema (3.10) con τ fijo transfiriendo adecuadamente la condición $\psi_\xi(\infty, \theta) = 0$ a ξ_∞ es parecido en algunos aspectos al utilizado por Fornberg [FO] y puede describirse de la siguiente manera:

- a) Elegimos un valor de ξ , ξ_∞ , suficientemente grande para que pueda considerarse que la reacción está congelada (excepto en la capa límite) de forma que la ecuación se reduce a la de Laplace. Suponemos conocida $\psi(\xi_\infty, \theta)$ que denominaremos $g_1(\theta)$.
- b) Determinamos la función ψ en $\xi > \xi_\infty$, que denominaremos ψ_{ext} , resolviendo el problema (3.10) en la región exterior ($\xi > \xi_\infty$) con las condiciones de contorno (3.10b) más la condición de Dirichlet $\psi_{ext}(\xi_\infty, \theta) = g_1(\theta)$. De la solución deducimos $f(\theta) = \partial\psi_{ext}(\xi_\infty, \theta)/\partial\xi$ lo que constituye una relación entre $f(\theta)$ y $g_1(\theta)$.
- c) A continuación calculamos ψ en la región interior ($0 < \xi < \xi_\infty$), ψ_{int} , con las condiciones (3.10a) excepto $\psi_\xi(\infty, 0) = 0$ que es reemplazada por la condición de Neumann $\partial\psi_{int}(\xi_\infty, \theta)/\partial\xi = f(\theta)$, obteniendo $g_2(\theta) = \psi_{int}(\xi_\infty, \theta)$, que depende de $f(\theta)$ y, por consiguiente, de $g_1(\theta)$.
- d) Finalmente tenemos en cuenta las condiciones de acoplamiento entre las soluciones interior y exterior que pueden expresarse como:

$$\psi_{int}(\xi_\infty, \theta) = \psi_{ext}(\xi_\infty, \theta) \quad (\text{continuidad de la temperatura})$$

$$\frac{\psi_{int}(\xi_\infty, \theta)}{\partial\xi} = \frac{\psi_{ext}(\xi_\infty, \theta)}{\partial\xi} \quad (\text{continuidad del flujo de calor})$$

La segunda se verifica puesto que ha sido utilizada en c). Si se verifica también la primera se ha localizado ya la solución. Si, como es de esperar,

esto no ocurre procedemos a resolver de nuevo el problema exterior utilizando para la condición de Dirichlet la función $g_2(\theta)$. De esta manera se genera un método iterativo que finaliza cuando la norma de $g_1(\theta) - g_2(\theta)$ sea menor que un error predeterminado. Aparentemente es necesario que el problema exterior admita solución analítica o semianalítica, sin embargo hay que tener en cuenta que la única información que necesitamos obtener es el flujo de calor que debe llegar desde la región interior para que se verifique $\psi_\xi(\infty, \theta) = 0$ cuando la temperatura en $\xi = \xi_\infty$ es $g_1(\theta)$. Nótese que este requerimiento es análogo al que se encontraba en el caso unidimensional. El flujo de calor $f(\theta)$ puede calcularse mediante un procedimiento analítico o numérico, lo fundamental es que éste permita imponer correctamente la condición $\psi_\xi(\infty, \theta) = 0$.

3.4.3 Solución de (3.10) cuando $\xi \gg 1$

Consideremos $\xi \sim \xi_\infty \gg 1$ y llamemos $\eta = \xi/\xi_\infty$, en esta variable el problema (3.10) se escribe como:

$$\Delta\psi + \tau\xi_\infty^2 \exp\left[\psi - \frac{1}{2}\xi_\infty^2\eta^2\sin 2\theta\right] = 0 \quad (3.14a)$$

$$\psi(\eta, 0) = \psi_\theta(\eta, \pi/4) = \psi_\eta(\infty, \theta) = 0; \quad \psi(1, \theta) = g(\theta) \quad (3.14b)$$

Solución exterior $\theta \sim \mathcal{O}(1)$

Si suponemos que $\theta \sim 1$ y efectuamos en (3.14) el límite $\xi_\infty \rightarrow \infty$ el término no lineal tiende a cero exponencialmente.

Consideremos para ψ un desarrollo de la forma

$$\psi = \mu_1(\xi_\infty)U_1(\eta, \theta) + \mu_2(\xi_\infty)U_2(\eta, \theta) + \dots \quad (3.15)$$

con $U_i(\eta, \theta)$ de orden unidad, de manera que se verifique

$$\lim_{\xi_\infty \rightarrow \infty} \frac{\mu_{i+1}(\xi_\infty)}{\mu_i(\xi_\infty)} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots) \quad (3.16)$$

Al llevar (3.15) a (3.14) y tener en cuenta (3.16) se obtiene la siguiente colección de problemas para U_i :

$$\Delta U_i = 0 \quad (3.17a)$$

$$U_{i,\theta}(\eta, \pi/4) = U_{i,\eta}(\infty, \theta) = 0, \quad U_i(1, \theta) = g_i(\theta) \quad (3.17b)$$

siendo $g_i(\theta)$ los coeficientes del desarrollo de $g(\theta)$ análogo a (3.15). Las condiciones en $\theta = 0$ se deducen del acoplamiento con la solución en la capa límite.

Solución interior $\theta \ll 1$

El término no lineal de (3.14) se anula cuando $\xi_\infty \rightarrow \infty$ excepto en una capa delgada donde en la cual $\xi_\infty^2 \theta = \mathcal{O}(1)$ y que está situada en torno a $\theta = 0$, es decir, muy cerca de la superficie del sólido. El espesor de la misma es del orden de $1/\xi_\infty$ y va siendo más delgada a medida que nos alejamos de la esquina.

Para el análisis de esta capa la variable apropiada es $x = \xi_\infty^2 \theta$, con lo cual (3.14) es:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \frac{\xi_\infty^4}{\eta^2} + \tau \xi_\infty^2 \exp \left[\psi - \frac{1}{2} \xi_\infty^2 \eta^2 \sin \frac{2x}{\xi_\infty^2} \right] = 0 \quad (3.18)$$

Escribiendo para ψ un desarrollo de la forma:

$$\psi = \nu_1(\xi_\infty) V_1(\eta, x) + \nu_2(\xi_\infty) V_2(\eta, x) + \nu_3(\xi_\infty) V_3(\eta, x) + \dots \quad (3.19)$$

con $\lim_{\xi_\infty \rightarrow \infty} \nu_{i+1}(\xi_\infty)/\nu_i(\xi_\infty) = 0$, que llevado a (3.19) y teniendo en cuenta el desarrollo de la función seno da lugar a las siguientes ecuaciones para V_1 , V_2 y V_3 :

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\nu_1) &= \frac{1}{\xi_\infty^2} : \quad \frac{1}{\eta^2} \frac{\partial^2 V_1}{\partial x^2} + \tau e^{-\eta^2 x} = 0 \\ \mathcal{O}(\nu_2) &= \frac{1}{\xi_\infty^4} : \quad \frac{1}{\eta^2} \frac{\partial^2 V_2}{\partial x^2} + \tau V_1 e^{-\eta^2 x} = 0 \\ \mathcal{O}(\nu_3) &= \frac{1}{\xi_\infty^6} : \quad \frac{1}{\eta^2} \frac{\partial^2 V_3}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V_1}{\partial \eta^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial V_1}{\partial \eta} + \tau \left[V_2 + \frac{V_1^2}{2} + \frac{2}{3} \eta^2 x^3 \right] e^{-\eta^2 x} = 0 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Todas las funciones V_i dependen de η de forma paramétrica debido a que en el interior de la capa límite sólo intervienen las derivadas normales. En las condiciones de contorno para V_i no intervienen las relativas a η de manera que las ecuaciones anteriores deben resolverse con la condición $V_i(\eta, 0) = 0$. Las soluciones para V_1 y V_2 son:

$$\begin{aligned} V_1(\eta, x) &= A_1 \eta^2 x + \frac{\tau}{\eta^2} (1 - e^{-\eta^2 x}) \\ V_2(\eta, x) &= A_2 \eta^2 x - A_1 \tau x e^{-\eta^2 x} + \\ &\quad \frac{\tau}{\eta^2} (1 - e^{-\eta^2 x}) \left(2A_1 + \frac{\tau}{4\eta^2} (3 - e^{-\eta^2 x}) \right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

siendo A_1 y A_2 funciones de η a determinar.

Acoplamiento de ambas soluciones

De acuerdo con [KC, p.9] el acoplamiento entre ambas soluciones supone definir una variable intermedia θ_σ e imponer la condición de que, manteniendo θ_σ constante, las dos soluciones coincidan cuando $\xi_\infty \rightarrow \infty$. Más exactamente debe verificarse:

$$\lim_{\substack{\xi_\infty \rightarrow \infty \\ \theta_\sigma \text{ fijo}}} \left\{ \frac{\sum \mu_i U_i - \sum \nu_i V_i}{(1/\xi_\infty^2)^n} \right\} = 0 \quad (3.22)$$

para $n = 0, 1, 2, \dots$. La variable intermedia θ_σ se define como $\theta_\sigma = \theta\sigma$ donde σ es tal que $1 \ll \sigma \ll \xi_\infty^2$ y la variable x se expresa como $x = \theta_\sigma \xi_\infty^2 / \sigma$ de manera que cuando θ_σ permanece constante y $\xi_\infty \rightarrow \infty$ entonces $x \rightarrow \infty$ y $\theta \rightarrow 0$.

Para realizar el límite anterior es necesario encontrar expresiones para la solución interior y exterior cuando $x \rightarrow \infty$ y $\theta \rightarrow 0$, respectivamente. De (3.21) se deduce:

$$\begin{aligned} x \rightarrow \infty : \quad V_1(\eta, x) &= A_1 \eta^2 x + \frac{\tau}{\eta^2} + \text{t.e.p.} \\ x \rightarrow \infty : \quad V_2(\eta, x) &= A_2 \eta^2 x + \frac{2A_1 \tau}{\eta^2} + \frac{3\tau^2}{4\eta^2} + \text{t.e.p.} \end{aligned} \quad (3.23)$$

La solución exterior puede escribirse cuando $\theta \rightarrow 0$ como:

$$\psi = \mu_1 \left\{ U_1(\eta, 0) + \frac{\partial U_1(\eta, 0)}{\partial \theta} \theta + \dots \right\} + \mu_2 \left\{ U_2(\eta, 0) + \frac{\partial U_2(\eta, 0)}{\partial \theta} \theta + \dots \right\} + \dots \quad (3.24)$$

Escribiendo (3.23) y (3.24) en función de θ_σ y llevando estas expresiones a (3.22) se deducen las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} n = 0 \quad \lim_{\xi_\infty \rightarrow \infty} \mu_1 &= 0 \\ n = 1 \quad \mu_1 = 1/\xi_\infty^2, \quad U_1(\eta, 0) &= \frac{\tau}{\eta^2}, \quad A_1 = 0 \\ n = 2 \quad \mu_2 = 1/\xi_\infty^2, \quad U_2(\eta, 0) &= \frac{3\tau^2}{4\eta^4}, \quad \frac{\partial U_1(\eta, 0)}{\partial \theta} = A_2 \eta^2 \end{aligned} \quad (3.25)$$

La solución en la capa límite puede, por tanto, escribirse como:

$$\begin{aligned} \psi_{cl} &= \frac{1}{\xi_\infty^2} \frac{\tau}{\eta^2} \left(1 - e^{-\eta^2 x} \right) + \\ &\quad \frac{1}{\xi_\infty^4} \left[x \frac{\partial U_1(\eta, 0)}{\partial \theta} + \frac{\tau^2}{\eta^4} \left(\frac{3}{4} - e^{-\eta^2 x} + \frac{1}{4} e^{-2\eta^2 x} \right) \right] + o(\xi_\infty^{-4}) \end{aligned} \quad (3.26)$$

La solución exterior está determinada por los siguientes problemas:

$$\left. \begin{aligned} \Delta U_1 &= 0 \\ U_1(1, \theta) - g_1(\theta) &= U_1(\eta, 0) - \frac{\tau}{\eta^2} = \\ U_{1,\theta}(\eta, \pi/4) &= U_{1,\eta}(\infty, \theta) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.27a)$$

$$\left. \begin{aligned} \Delta U_2 &= 0 \\ U_2(1, \theta) - g_2(\theta) &= U_2(\eta, 0) - \frac{3\tau^2}{4\eta^4} = \\ U_{2,\theta}(\eta, \pi/4) &= U_{2,\eta}(\infty, \theta) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.27b)$$

En lo que sigue retendremos únicamente el primer término del desarrollo de ambas soluciones para ser coherentes con (3.10) donde despreciábamos los términos de orden ε cuando ψ era de orden unidad. Obsérvese que el término de reacción en (3.9) se hace exponencialmente pequeño cuando ξ^2 es de orden $1/\varepsilon$. Por tanto los términos de orden ε en (3.10) darían lugar ahora a términos adicionales de orden $\varepsilon^2 \sim 1/\xi_\infty^4$.

En las condiciones de contorno para el problema (3.29) el valor de la temperatura en la pared no es nulo sino igual a τ/ξ^2 , que representa el incremento de temperatura generado por la capa límite y que en la escala de la región exterior aparece como una función escalón.

El apéndice 3.3 recoge los detalles del proceso de resolución del problema para U_1 . Este puede abordarse mediante técnicas de separación de variables o mediante la función de Green. El primer método, más útil desde el punto de vista numérico, supone realizar un análisis de Fourier y proporciona la solución como una serie de funciones. El principal inconveniente del segundo método es la complejidad de las integrales dobles que definen la solución. Si bien no es posible obtener la solución analítica para U_1 utilizando la función de Green si puede calcularse la expresión de $\partial U_1(1, \theta)/\partial \eta$ que, como hemos señalado antes, es la única información necesaria. Por esta razón emplearemos este último procedimiento. A continuación expondremos las líneas generales de la resolución de:

$$\left. \begin{aligned} \Delta U_1 &= 0 \\ U_1(1, \theta) - g_1(\theta) &= U_1(\eta, 0) - \frac{\tau}{\eta^2} = \\ U_{1,\theta}(\eta, \pi/4) &= U_{1,\eta}(\infty, \theta) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.28)$$

en el dominio $]1, \infty[\times]0, \pi/4[$, donde $g_1(\theta)$ es una función conocida que depende paramé-
tricamente de τ .

Haciendo $F = U_1 - \tau/\eta^2$, (3.28) se transforma en:

$$\begin{aligned} \Delta F &= -4\tau/\eta^4 \\ F(1, \theta) - g_1(\theta) + \tau &= F(\eta, 0) = \\ F_{\theta}(\eta, \pi/4) &= F_{\eta}(\infty, \theta) = 0, \end{aligned} \quad (3.29)$$

Descomponemos F en $F_1 + F_2$ cada una de las cuales verifica:

$$\left. \begin{aligned} \Delta F_1 &= 0 \\ F_1(1, \theta) - g_1(\theta) + \tau &= F_1(\eta, 0) = \\ F_{1,\theta}(\eta, \pi/4) &= F_{1,\eta}(\infty, \theta) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.30)$$

$$\left. \begin{aligned} \Delta F_2 &= -\frac{4\tau}{\eta^4} \\ F_2(1, \theta) &= F_2(\eta, 0) = \\ F_{2,\theta}(\eta, \pi/4) &= F_{2,\eta}(\infty, \theta) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.31)$$

El problema (3.30) puede resolverse fácilmente mediante separación de varia-
bles para dar:

$$F_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{8}{\pi}} a_n(\tau) \eta^{\lambda_n} \text{sen} \lambda_n \theta \quad (3.32)$$

siendo

$$\lambda_n = 2(2n - 1), \quad a_n(\tau) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \int_0^{\pi/4} \{g_1(\theta) - \tau\} \text{sen} \lambda_n \theta \, d\theta \quad (3.33)$$

Obteniéndose:

$$F_{1,\eta} = -\sqrt{\frac{8}{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n \text{sen} \lambda_n \theta \quad (3.34)$$

El problema (3.31) se resuelve utilizando la función de Green correspon-
diente al dominio $]1, \infty[\times]0, \pi/2[$ con condiciones nulas de Dirichlet en el contorno y de
Neumann en $\eta = \infty$. El resultado que nos interesa es:

$$F_{2,\eta}(1, \theta) = \frac{4\tau}{\pi} (\text{sen} 2\theta \ln(2\text{sen} 2\theta) - 2\theta \cos 2\theta - \pi \text{sen}^2 \theta) \quad (3.35)$$

Con lo cual, teniendo en cuenta que $\mu_1 = 1/\xi_\infty^2$ y $\eta = \xi/\xi_\infty$, se obtiene:

$$\frac{\partial \psi_{ext}(\xi_\infty, \theta, \tau)}{\partial \xi} = -\frac{2}{\xi_\infty^3} \left\{ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n \sin \lambda_n \theta + \tau \left[1 + 2\sin^2 \theta + \frac{2}{\pi} (2\theta \cos 2\theta - \sin 2\theta \ln(2\sin 2\theta)) \right] \right\} \quad (3.36)$$

En la segunda parte del apéndice 3.3 se ha resuelto (3.31) mediante separación de variables para, de esta manera, poder encontrar el comportamiento asintótico de ψ . Como era de esperar éste coincide con el del problema lineal, es decir, ψ decae como $\ln \xi/\xi^2$ cuando $\xi \rightarrow \infty$.

3.4.4 Solución de (3.10) y determinación del valor máximo de τ

Una vez calculada la función $f(\theta) = \partial \psi_{ext}(\xi_\infty, \theta)/\partial \xi$ dada por (3.36) el problema (3.10) puede reformularse como:

$$\Delta \psi + \tau \exp \left[\psi - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta \right] = 0 \quad (0 < \xi < \xi_\infty) \quad (3.37a)$$

$$\psi(\xi, 0) = \psi_\theta(\xi, \pi/4) = \psi_\xi(\xi_\infty, \theta) - f(\theta) = 0 \quad (3.37b)$$

Nótese que la última de las condiciones (3.37b) es, en definitiva, una relación entre $\psi_\xi(\xi_\infty, \theta)$ y $\psi(\xi_\infty, \theta)$ a través de los coeficientes a_n que intervienen en (3.36). De esta forma (3.37) es el problema equivalente a (3.10) pero definido en un dominio acotado. Este problema es no lineal tanto en la ecuación como en las condiciones de contorno y tiene que abordarse necesariamente mediante métodos numéricos.

Como se ha demostrado en el apéndice 3.1 el problema (3.10) carece de solución si τ es mayor que un cierto τ_{lim} . Nuestro objetivo ahora es determinar este valor y obtener la solución inferior. Este aspecto es común al problema de Frank-Kamenetskii y ha sido ampliamente analizado en [BO].

Una forma de describir la dependencia de la solución $\psi(\xi, \theta)$ respecto del parámetro τ es obtener la función $\|\psi\|(\tau)$, donde $\|\psi\|$ representa alguna norma apropiada para ψ y que aquí adoptaremos, por simplicidad, $\|f\| = \|f\|_\infty = \sup_{x \in \Omega} |f|$. Dado que el problema (3.37) es no lineal un procedimiento para resolverlo es emplear el método de Newton-Kantorovich [BL, p.211]. Si designamos por $G[\psi, \tau]$ al operador

$\Delta\psi + \tau e^{\psi - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta}$ y por $G_\psi[(\psi, \tau); \delta\psi]$ al operador lineal $\Delta\delta\psi + \tau e^{\psi - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta} \delta\psi$ la secuencia de problemas lineales que resuelve $G = 0$ para τ dado es:

$$G_\psi[\psi^i, \tau] \delta\psi^i = -G[\psi^i, \tau]$$

con $\psi^{i+1} = \psi^i + \delta\psi^i$ e $i = 0, 1, 2, \dots$.

El principal inconveniente de este método es la necesidad de disponer de una aproximación inicial ψ^o suficientemente buena para comenzar el ciclo de iteraciones. En caso contrario el método diverge. Esto conduce a los métodos de continuación en los que se parte de una solución conocida (ψ_o, τ_o) que se usa como aproximación inicial ψ_1^o para calcular la solución en $\tau_1 = \tau_o + \delta\tau$, donde $\delta\tau$ es un incremento suficientemente pequeño. Repitiendo este proceso puede calcularse ψ en cualquier valor de τ . En nuestro caso comenzaríamos en $\tau_o \ll 1$ y ψ_o se obtendría a partir de la solución del problema lineal. Puede mejorarse la convergencia si determinamos la derivada $\psi_{o,\tau}$ y tomamos como aproximación inicial $\psi_1^o = \psi_o + \psi_{o,\tau} \delta\tau$ en lugar de ψ_o .

En cualquier caso este procedimiento no permite determinar con precisión el valor de τ_{lim} pues, por una parte, si τ_j es tal que $\tau_j < \tau_{lim} < \tau_j + \delta\tau = \tau_{j+1}$ el método no converge en τ_{j+1} pues el problema carece ya de solución y, por otra, el punto correspondiente a τ_{lim} es un punto límite debido a que la función $\|\psi\|(\tau)$ es multivaluada y en consecuencia ψ_τ deja de estar acotada en él, con lo cual si $\tau + \delta\tau$ es menor pero muy próximo a τ_{lim} las aproximaciones iniciales que obtenemos podrían no ser suficientemente buenas para lograr la convergencia.

Para solventar este inconveniente se han desarrollado métodos de continuación basados en utilizar el parámetro longitud de arco de la curva $(\|\psi\|, \tau)$ como parámetro de continuación, por ejemplo [BC], [CK] y [KE]. Boyd [BO] ha utilizado otro método que denomina intercambio de parámetro. Consiste en observar que aunque la función $\|\psi\|(\tau)$ es multivaluada su función inversa $\tau(\|\psi\|)$ es univaluada lo que sugiere considerar como parámetro $\|\psi\|$ en lugar de τ , pasando τ a ser una incógnita del problema. Dado un valor de $\|\psi\| = \alpha$ y unas aproximaciones iniciales ψ^ν y τ^ν , la función ψ , cuya norma es α , y el valor de τ que verifican (3.37) se determinan a través de

$\delta\psi^\nu = \psi - \psi^\nu$ y $\delta\tau^\nu = \tau - \tau^\nu$, mediante la secuencia de problemas lineales:

$$\begin{aligned} -G_\psi^\nu[\delta\psi^\nu] - G_\tau^\nu[\delta\tau^\nu] &= G^\nu \\ \delta\psi^\nu(\xi, 0) &= \delta\psi_\theta^\nu(\xi, \pi/4) = \delta\psi_\xi^\nu(\xi_\infty, \theta) = 0 \\ \|\psi^\nu + \delta\psi^\nu\| &= \alpha \end{aligned} \quad (3.38)$$

donde

$$\begin{aligned} G_\psi^\nu[w] &= \Delta w + \tau^\nu \exp \left[\psi^\nu - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta \right] w \\ G_\tau^\nu[u] &= \exp \left[\psi^\nu - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta \right] u \\ G^\nu &= \Delta\psi^\nu + \tau^\nu \exp \left[\psi^\nu - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta \right] \end{aligned} \quad (3.39)$$

Este es el método que emplearemos pues es de implementación más simple que los anteriores.

Tomando como nuevas variables independientes x e y definidas mediante $\xi = e^{sx} - 1$ y $\theta = \pi y/4$ con $s = \ln(1 + \xi_\infty)$ el dominio $]0, \xi_\infty[\times]0, \pi/4[$ se transforma en el cuadrado de lado unidad. En el apéndice 3.4 se describe el proceso de discretización de (3.38) que conduce al siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{pmatrix} B^{*,\nu} & -F^{*,\nu} \\ v^T & -f^\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta X^\nu \\ \delta\tau^\nu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^{*,\nu} \\ r^\nu \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

El significado de cada uno de los términos en (3.40) está explicado en el apéndice 3.4, pero de manera muy general podemos decir que la matriz pentadiagonal $B^{*,\nu}$ está asociada al operador $-G_\psi^\nu$, los vectores $-F^{*,\nu}$ y $R^{*,\nu}$ a los operadores $-G_\tau^\nu$ y G^ν respectivamente, el vector v^T y los escalares $-f^\nu$ y r^ν son consecuencia de la condición $\|\psi^\nu + \delta\psi^\nu\| = \alpha$ y δX^ν es el vector formado por las incógnitas $\delta\psi^\nu$ en cada punto de la malla.

El sistema (3.40) podría resolverse mediante el algoritmo propuesto por Keller [KE, p.377]:

1. Resolver $B^{*,\nu} p = R^{*,\nu}$ y $B^{*,\nu} q = -F^{*,\nu}$
2. Calcular $\delta\tau^\nu = (r^\nu - v^T \cdot p) / (-f^\nu - v^T \cdot q)$
3. Calcular $\delta X^\nu = p - \delta\tau^\nu q$

(3.41)

Para ello sería necesario factorizar la matriz $B^{*,\nu}$, lo que, teniendo en cuenta su tamaño y aún empleando métodos adaptados para matrices banda, requiere un gran esfuerzo computacional. Además calcularíamos la solución exacta de (3.40) que, como indicamos más abajo, no es necesario.

Dado que la matriz $B^{*,\nu}$ es tridiagonal por bloques, siendo los de la diagonal principal tridiagonales y los restantes diagonales, es muy apropiado el empleo de métodos iterativos como LSOR [BL, p.385], [LP, p.418]. Siguiendo la idea de los métodos ADI cada iteración es realizada en dos etapas: primero se resuelve por filas, considerando únicamente los puntos de la malla con $y = \text{constante}$, y posteriormente por columnas ($x = \text{constante}$). De esta manera se consigue que las condiciones de contorno en $x = 0$ y $x = 1$ sean tratadas de igual forma que las correspondientes a $y = 0$ e $y = 1$. El algoritmo resultante es empleado más como "suavizador" que como "resolvidor" pues según señala Ames [AM, p.397] no es rentable efectuar un gran número de iteraciones interiores (asociadas al algoritmo para resolver el sistema de ecuaciones) que proporcionen una solución muy precisa de (3.40), pues ésta se modificará inmediatamente en la iteración exterior (asociada al método de Newton para resolver la ecuación no lineal (3.37)) cuando se considere $X^{\nu+1} = X^{\nu} + \delta X^{\nu}$ y se proceda a calcular $\delta X^{\nu+1}$.

Si identificamos los distintos valores del parámetro de continuación $\alpha \equiv \|\psi\|$ mediante el subíndice k y los resultados de las iteraciones exteriores mediante el superíndice ν , el esquema del método seguido para resolver (3.10) es:

- 1.- "Predictor" inicial. Se resuelve el problema lineal (3.11) para la variable $u = \psi/\tau$ con las condiciones (3.37b) considerando $f_1 \equiv 0$. Se determina τ_1^o tal que $\|\psi_1^o\| = \alpha_1$ y se calcula $\psi_1^o = \tau_1^o u$, de donde se deduce la función g_1^o . Mediante (3.36) se calcula f_1^o como resultado del problema exterior.
- 2.- "Corrector". Con ψ_k^{ν} , τ_k^{ν} y f_k^{ν} se resuelve el problema interior que consta de una iteración exterior que genera un sistema del tipo (3.40) como consecuencia del método de Newton y cuatro interiores para resolver mediante LSOR el sistema (3.40). Con los resultados $\psi_k^{\nu+1}$, $\tau_k^{\nu+1}$ y $g_k^{\nu+1}$ se determinan los coeficientes a_n definidos en (3.34) y se obtiene a partir de (3.36) la función $f_k^{\nu+1}$.
- 3.- "Test de convergencia". A continuación se realiza un test de convergencia sobre $R_k^{\nu+1}$ y $f_k^{\nu+1} - f_k^{\nu}$ en la forma $\|R_k^{\nu+1}\| < \varepsilon_R$ y $\|f_k^{\nu+1} - f_k^{\nu}\| < \varepsilon_f$. Si es

negativo se considera la solución calculada como el nuevo "predictor" para ψ_k y τ_k , y con $\nu = \nu + 1$ se vuelve a la etapa 2. Si es positivo se toma $\alpha_{k+1} = \alpha_k + \Delta\alpha$, se determinan los "predictor" ψ_{k+1}^o , t_{k+1}^o y f_{k+1}^o utilizando las soluciones anteriores y con $k = k + 1$ y $\nu = 0$ se vuelve a 2.

3.5 RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Una vez resuelto el problema (3.37) para distintos valores de $\|\psi\|_\infty$ se dispone de la relación entre τ y $\|\psi\|_\infty$ que se muestra en la figura 3.2. De ella puede deducirse el valor máximo de τ , τ_{lim} , para el cual existe solución. Este puede considerarse función de los parámetros que ha sido necesario fijar para construir la solución numérica: el radio ξ_∞ en el cual se imponen las nuevas condiciones de contorno y la malla empleada. ξ_∞ debe elegirse de manera que al resolver (3.10) cuando $\xi \gg 1$ se obtenga una aproximación adecuada reteniendo el primer término del desarrollo en potencias de $1/\xi_\infty^2$ de las soluciones exterior e interior. Al mismo tiempo interesa que ξ_∞ sea el más pequeño posible compatible con la condición anterior para que los gradientes en la parte de capa límite situada en $\xi < \xi_\infty$ y, por tanto, interior a la malla no sean excesivamente grandes. La figura 3.3 representa la variación de τ_{lim} con ξ_∞ para distintas mallas. Se observa que para $\xi_\infty > 15$ el valor de τ_{lim} depende solamente de la malla y no de ξ_∞ . Para eliminar esta dependencia podría pensarse en utilizar algún tipo de extrapolación, por ejemplo de Richardson [BL, p. 76], [FLT, pp. 90], para encontrar el valor asintótico de τ_{lim} cuando el tamaño de la malla tiende a cero. Sin embargo esto no es posible pues debido a que se emplea una malla no uniforme el orden del error de discretización es desconocido aunque puede considerarse intermedio entre h y h^2 . Un procedimiento para determinar cotas superior e inferior de $\tau_{lim}(h=0)$ puede ser el siguiente: si el método fuese de primer orden $\tau_{lim}(h=0) = 2\tau_{lim}(h/2) - \tau_{lim}(h) + \mathcal{O}(h^2)$, mientras que si fuese de segundo $\tau_{lim}(h=0) = (4\tau_{lim}(h/2) - \tau_{lim}(h))/3 + \mathcal{O}(h^4)$. A partir de los resultados correspondientes a las mallas de 100×100 y 50×50 se encuentra $\tau_{lim}(h/2) = 2.54609$ y $\tau_{lim}(h) = 2.54479$. Mediante las expresiones anteriores los valores extrapolados son: 2.5474 y 2.5465, de manera que podemos tomar:

$$\tau_{lim} = 2.547 \dots$$

El incremento de temperatura máximo que aparece en el curso del proceso es:

$$\|\psi\|_\infty(\tau_{lim}) = 1.42 \dots$$

que tiene lugar en un punto situado en $\theta = \pi/4$ y $\xi = 1.48 \dots$. Este incremento de temperatura es muy aproximadamente igual al que se obtenía en el análisis del caso unidimensional ($2 \ln 2 \sim 1.39 \dots$).

La figura 3.4 representa un aspecto general de la función $\psi = \psi(\xi, \theta, \tau)$ para $0 < \theta < \pi/4$ y distintos valores de τ hasta llegar a τ_{lim} y la figura 3.5 los perfiles de temperatura correspondientes a $\xi_{\infty} = 20$ en la que se aprecia claramente la capa límite cuyo espesor es del orden de .01. Las figuras 3.6, 3.7 y 3.8 muestran a los perfiles de temperatura correspondientes a $\theta = \pi/4$. La primera representa el incremento de temperatura respecto de la inerte. Se observa como el aumento más importante se produce a partir de $\tau = 2$. El punto en el cual se alcanza el máximo incremento está prácticamente fijo aunque en realidad se desplaza lentamente hacia el exterior (para $\tau = .5$ está situado en $\xi = 1.51$ mientras que en $\tau = \tau_{lim}$ está en $\xi = 1.48$). En la figura 3.7 se han dibujado las gráficas de la temperatura adimensional $\varphi = 1 + \psi - \xi^2/2$ así como la gráfica de la temperatura inerte. Para cada valor de τ existe un punto en el que φ alcanza un valor máximo mayor que la unidad. La posición de cada máximo está determinada por la ecuación $\partial\psi(\xi, \pi/4, \tau)/\partial\xi = \xi$. Mediante (3.12) puede demostrarse que para $\tau \ll 1$ está situado en $\xi \simeq \exp \left[-\frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{\tau} + a \right) \right]$ siendo $a = 11/12\pi - 4b_o\sqrt{2/\pi}$. Conforme transcurre el tiempo se desplaza hacia el interior de forma que en $\tau = \tau_{lim}$ se encuentra en $1.08 \dots$. La figura 3.8 es análoga a la anterior salvo que la variable independiente no es ξ sino la variable física $\xi\sqrt{\tau} = r/\sqrt{\pi\epsilon}$, lo que permite apreciar el avance de la onda térmica.

Otra magnitud de interés es el flujo de calor a través de la superficie. En ausencia de reacción está determinado por $q_i = -\frac{1}{\xi} \frac{\partial\varphi_i(\xi, 0)}{\partial\theta} = \xi$. Al incorporar el efecto de la misma la expresión es $q = \xi - \frac{1}{\xi} \frac{\partial\psi}{\partial\theta}$. El término $-\frac{1}{\xi} \frac{\partial\psi(\xi, 0)}{\partial\theta}$, que representa el flujo de calor debido a la reacción química, es nulo en el origen y tiende a $-1/\xi$ cuando $\xi \rightarrow \infty$ según se desprende de la solución de la capa límite. Existe un valor de ξ , ξ_q que depende de τ , para el cual se verifica $q = 0$, de manera que en $0 < \xi < \xi_q$ es $q < 0$ mientras que para $\xi > \xi_q$ es $q > 0$. La ecuación para determinar ξ_q es $\partial\psi(\xi, 0)/\partial\xi = \xi^2$, que para $\tau \ll 1$ tiene como solución $\xi_q = \exp \left[-\frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{\tau} - a' \right) \right]$ con $a' = 2/3\pi + 4b_o\sqrt{2/\pi}$. Las figuras 3.9 y 3.10 representan, respectivamente, el flujo de calor debido a la reacción química y el flujo de calor total.

Al comparar resultados del análisis del caso unidimensional la primera conclusión que puede extraerse es el importante papel que desempeña el efecto geométrico

asociado a la presencia de la esquina. Por una parte concentra el flujo de calor en la misma haciendo que la temperatura en la zona de reacción sea casi constante, siendo este hecho suficiente para cambiar el orden de magnitud del tiempo de ignición. Y por otra difunde de manera más eficaz hacia el interior el calor producido y como consecuencia no altera la zona de conducción no estacionaria.

Pueden señalarse otras dos diferencias. La temperatura dada por la solución cuasiestacionaria en la zona de reacción del caso unidimensional nunca excede el valor impuesto en la superficie. Ahora ocurre al revés: para $\tau > 0$ existe siempre una región en la cual $\varphi > 1$. Esta es cada vez más amplia según se observa en la figura 3.7 ó 3.8. Respecto del flujo de calor en la superficie puede realizarse una consideración similar. En la zona próxima a $\xi = 0$ el flujo de calor es negativo, es decir, de la zona de reacción hacia el exterior, y en el resto es positivo. En el caso unidimensional el flujo de calor es siempre positivo, de manera que en la teoría de Zeldovich el instante en que el flujo de calor se anula se identifica con el instante de ignición. El valor de τ_{lim} que se ha obtenido debe entenderse como un límite inferior para el tiempo de ignición. Como ya hemos señalado el modelo representado por el problema (3.10) deja de ser válido antes de alcanzar τ_{lim} , pues el término $\pi\epsilon\tau\psi_\tau$ de (3.9) llega a ser de orden unidad. El efecto de retener este término puede considerarse equivalente a la existencia de sumideros de calor distribuidos por todo el dominio. Su presencia tiende a disminuir la temperatura reduciendo el efecto del término de Arrhenius y permitiendo que exista solución para tiempos mayores que τ_{lim} . Nótese además que el efecto de sumidero ó pérdida de calor es tanto más importante cuanto mayor se ψ_τ , es decir cuanto más cerca estemos del instante en que se produce la ignición. En el apéndice 3.5 se ha realizado el análisis de esta última etapa en la cual los efectos no estacionarios representados por $\pi\epsilon\tau\psi_\tau$ no son despreciables, su inclusión supone una corrección en τ_{lim} del orden de $\epsilon^{2/3}$.

El tiempo de ignición dimensional puede calcularse a partir del tiempo característico definido en (3.2) obteniéndose:

$$t_{ig,2D} = \tau_{lim} \frac{e^{E/RT_s}}{\pi(qB/c_p T_s)} \left(1 - \frac{T_o}{T_s}\right)$$

de donde se deduce inmediatamente que los factores que aumentan el tiempo de ignición son la energía de activación, el calor específico y la diferencia entre la temperatura superficial y la inicial, mientras que el calor de reacción, el factor de frecuencia y la temperatura superficial lo disminuyen.

Igualmente es fácil encontrar la relación entre el tiempo de ignición bidimensional y el que correspondería a la situación con idénticos valores de todos los parámetros. A partir de (3.2) y (2.48) se tiene:

$$t_{ig,2D} = 2\tau_{lim}\varepsilon t_{ig,1D}$$

habiéndose tomado $D = 1$ en (2.48).

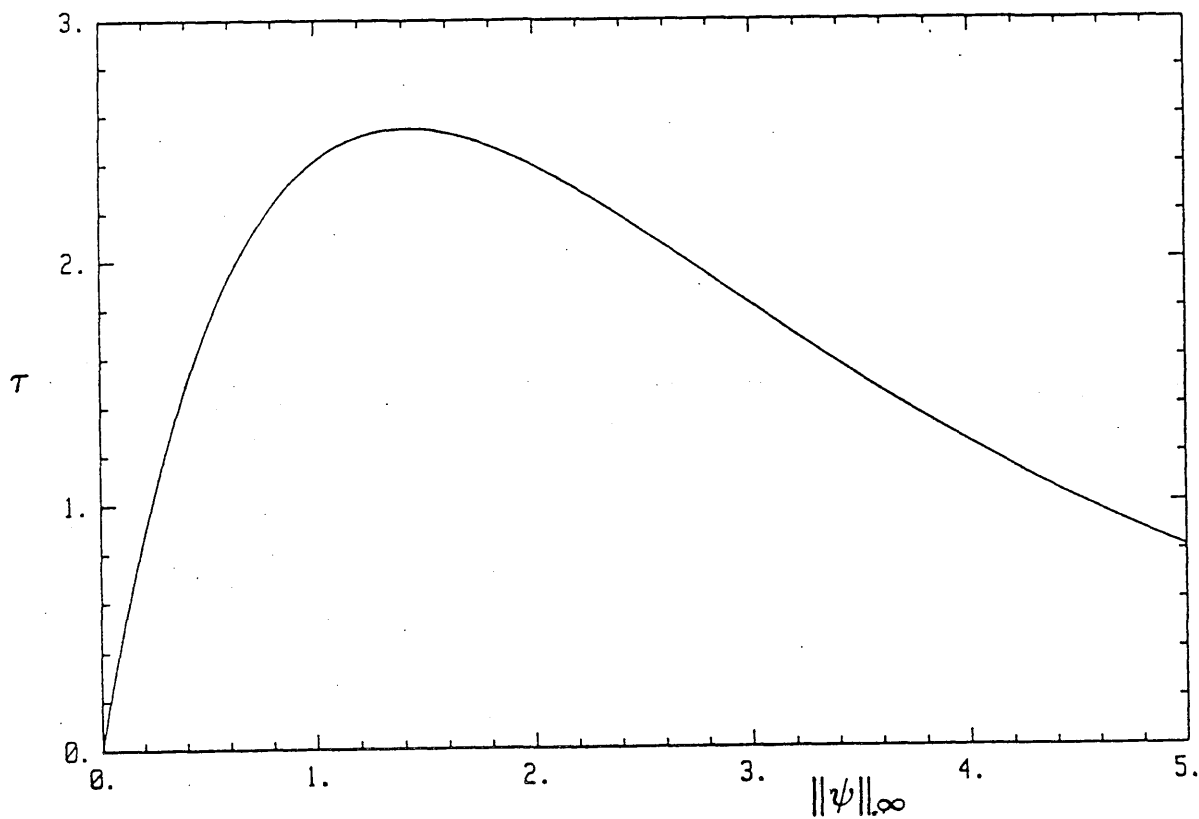


Figura 3.2 Gráfica de la función $\tau = \tau(\|\psi\|_\infty)$.

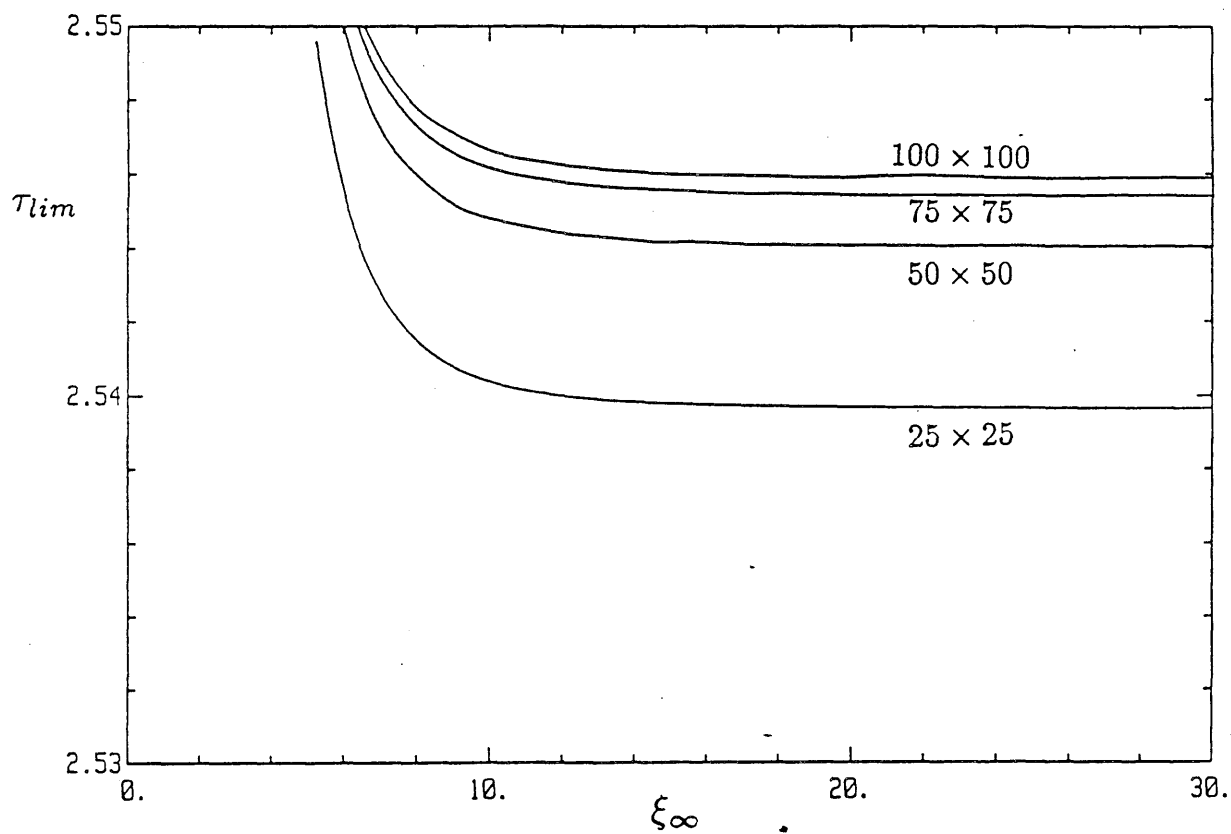


Figura 3.3 Valores de τ_{lim} para distintos valores de ξ_∞ y distintas mallas.

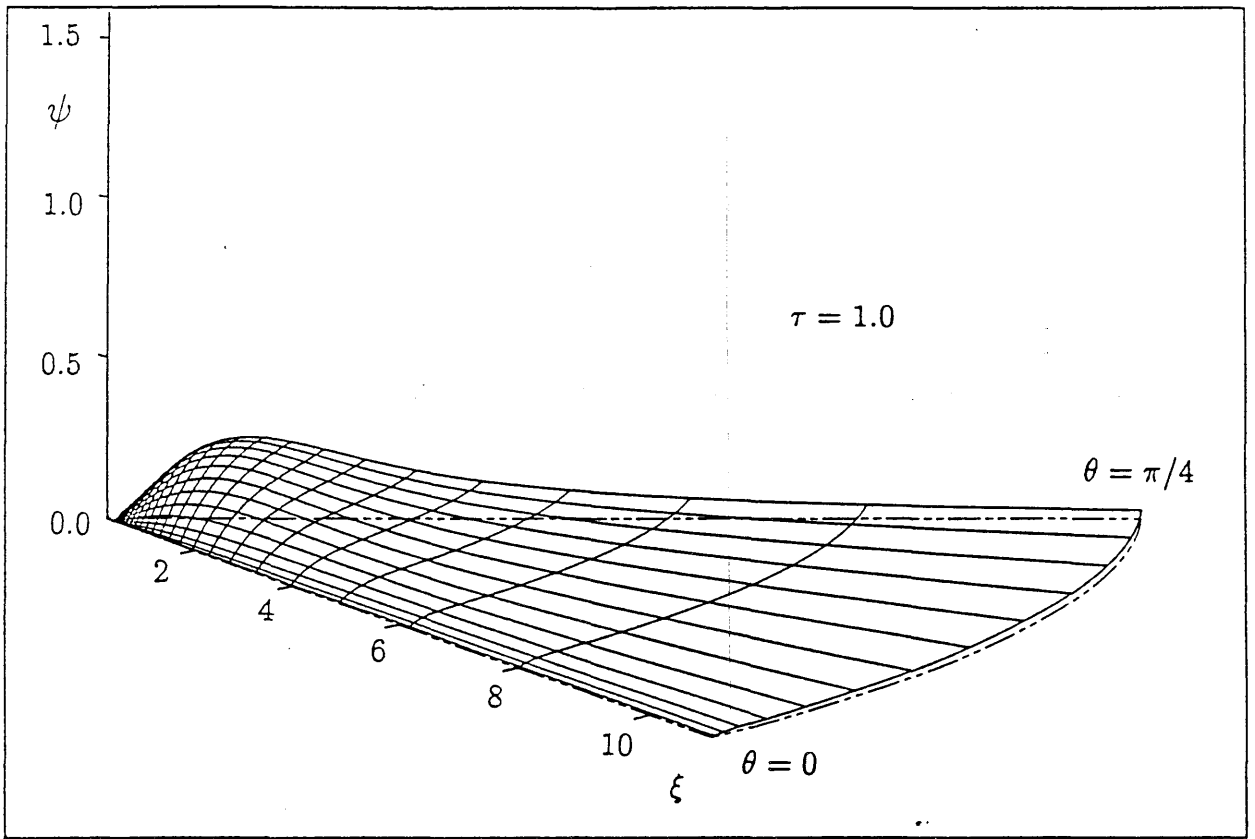


Figura 3.4.a Incremento de temperatura en $\tau = 1.0$.

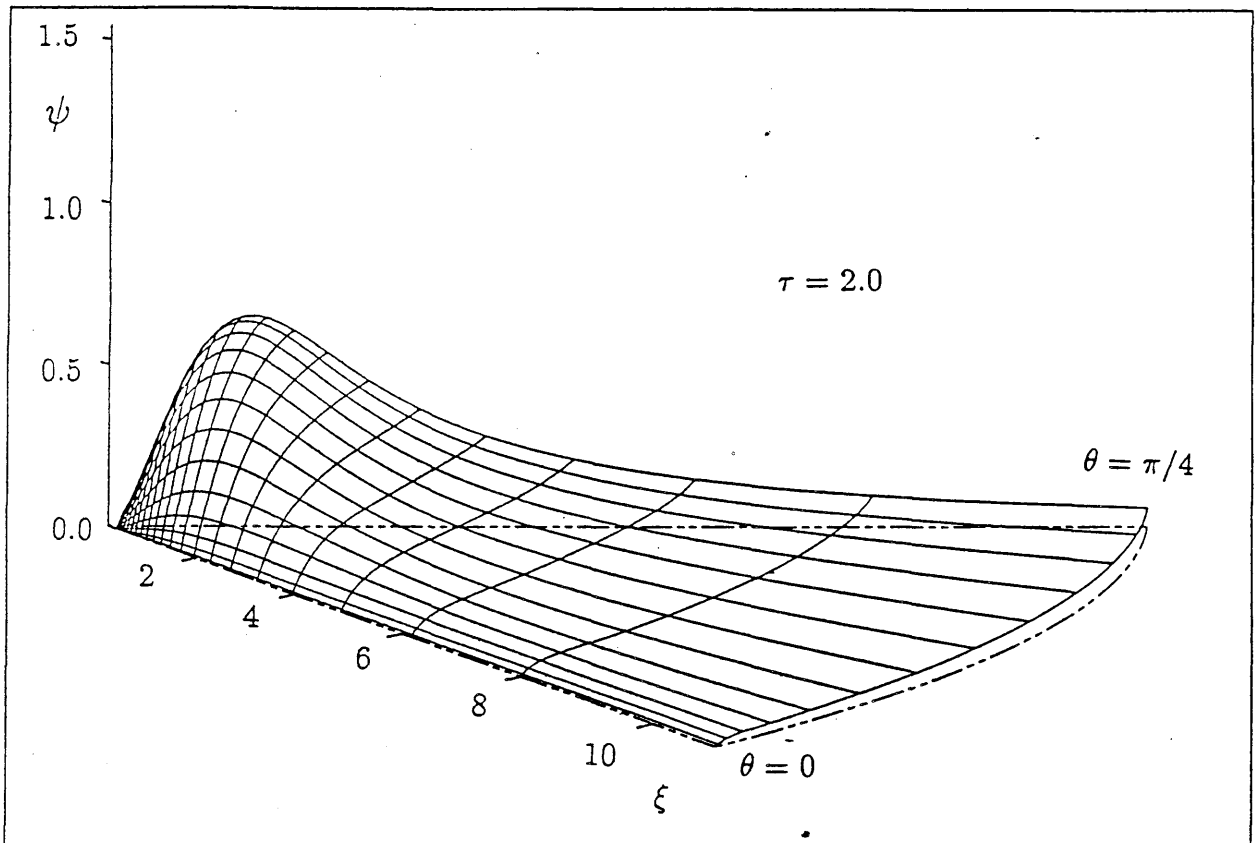


Figura 3.4.b Incremento de temperatura en $\tau = 2.0$.

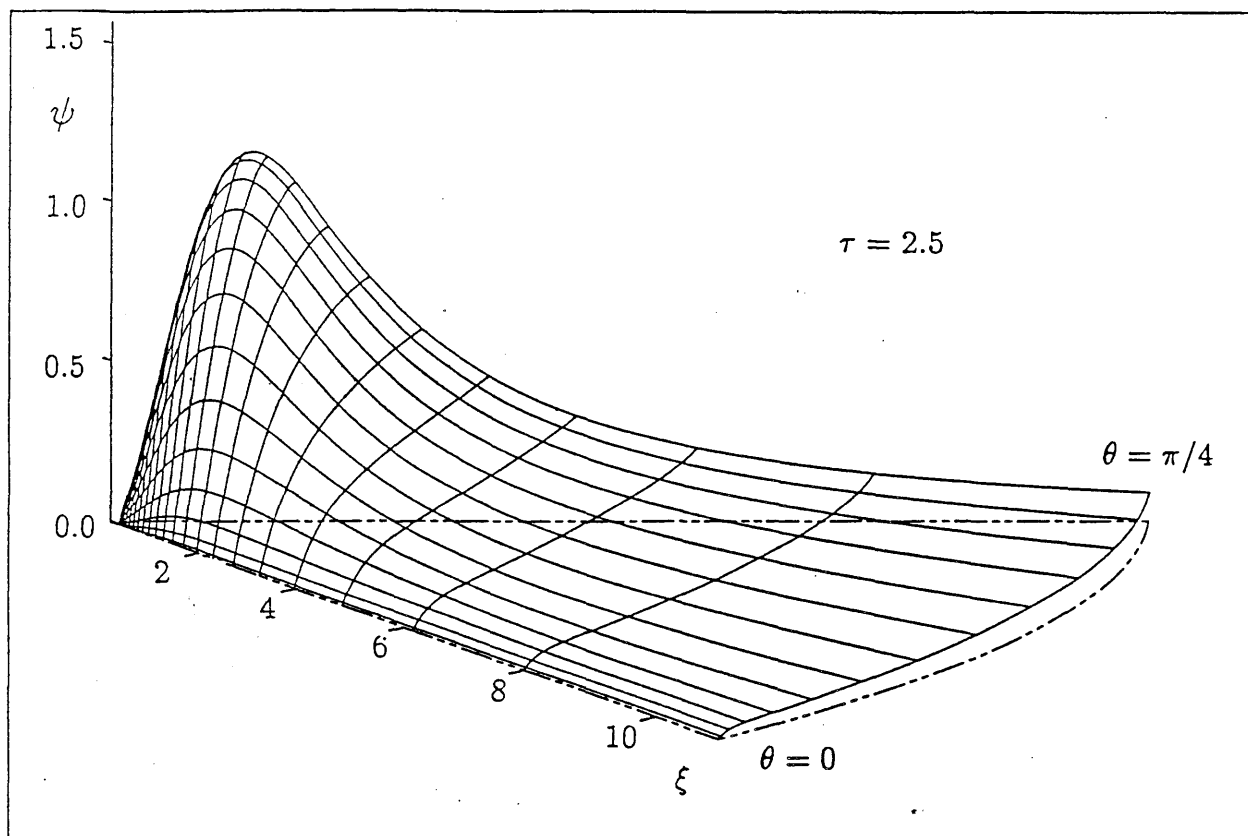


Figura 3.4.c Incremento de temperatura en $\tau = 2.5$.

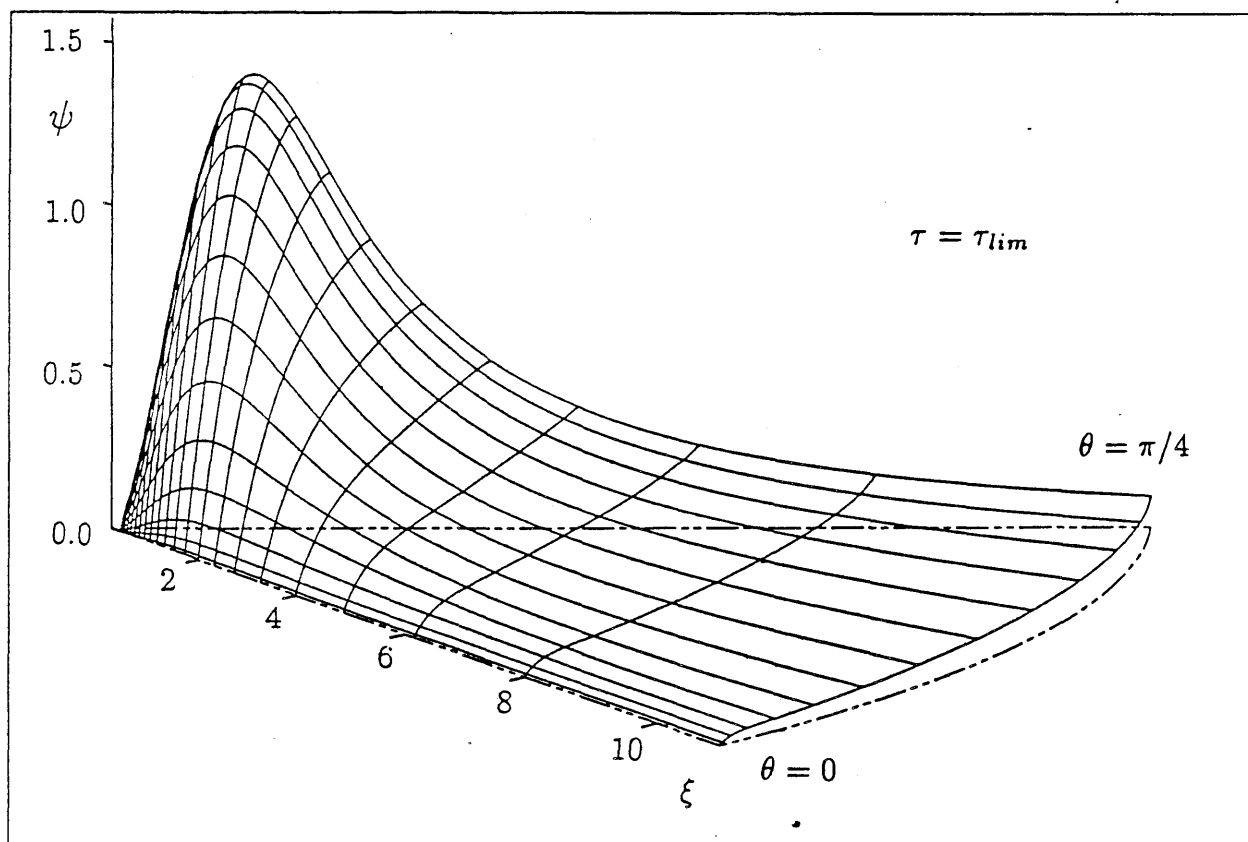


Figura 3.4.d Incremento de temperatura en $\tau = \tau_{lim}$.

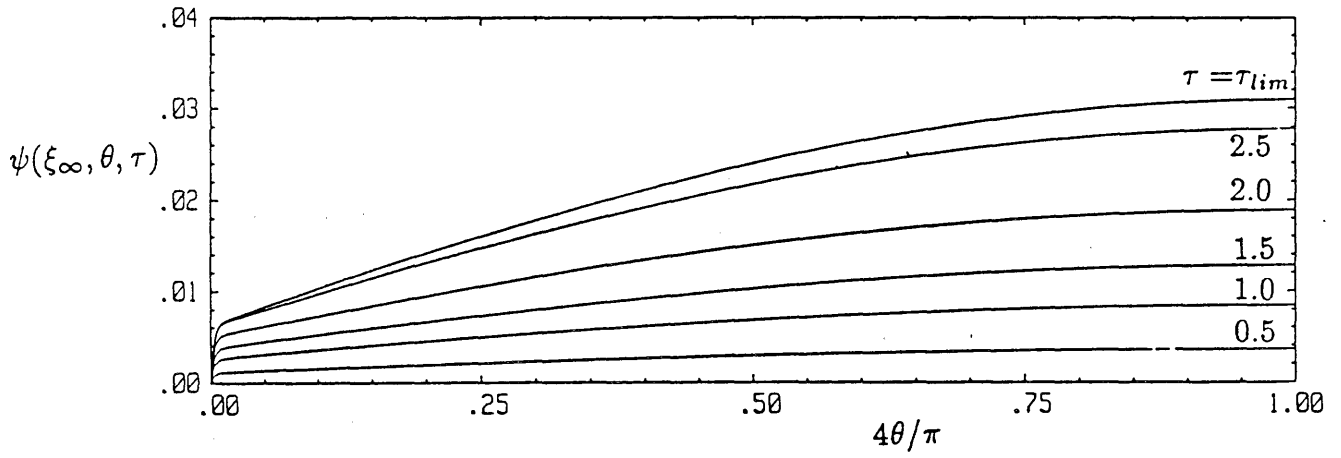


Figura 3.5 Incremento de temperatura en $\xi_\infty = 20$ y distintos valores de τ .

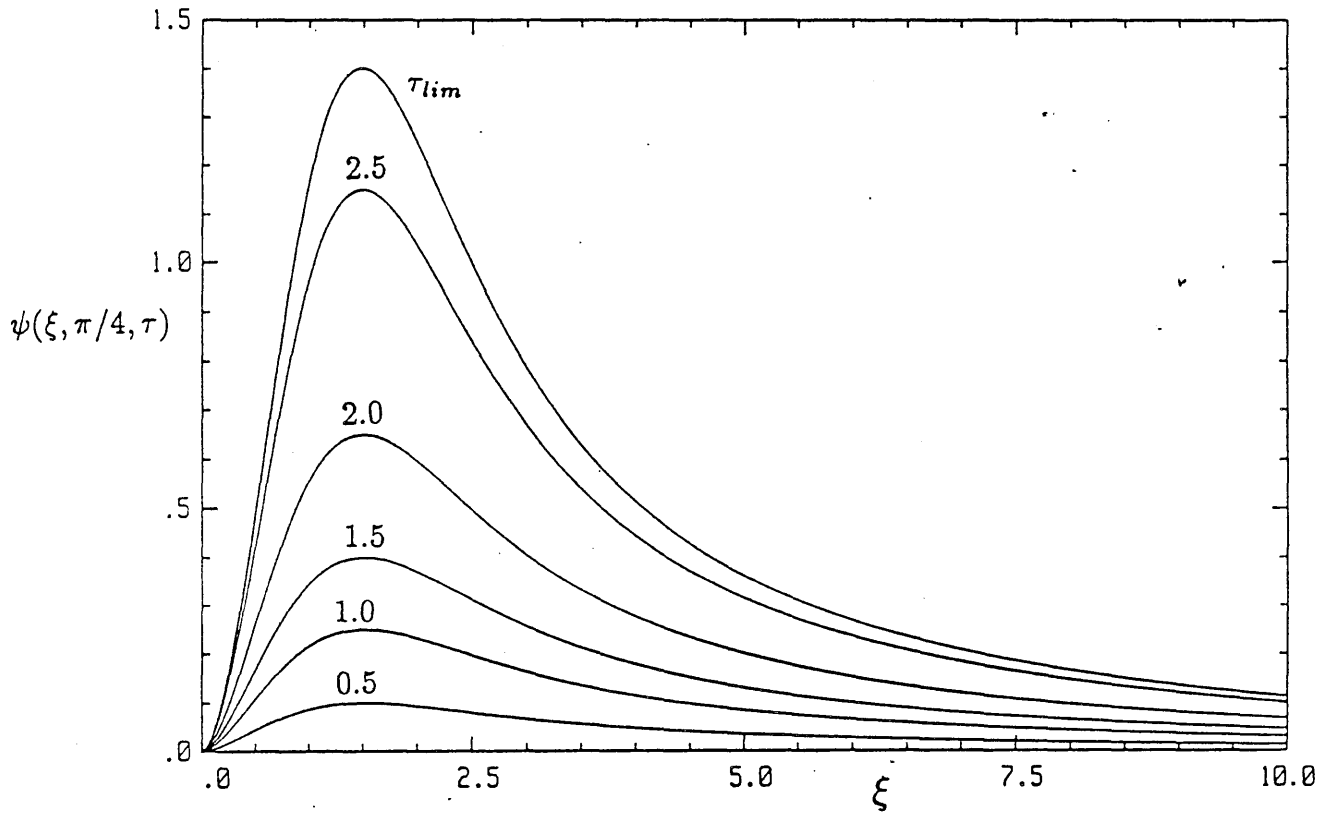


Figura 3.6 Incremento de temperatura en $\theta = \pi/4$ y distintos valores de τ .

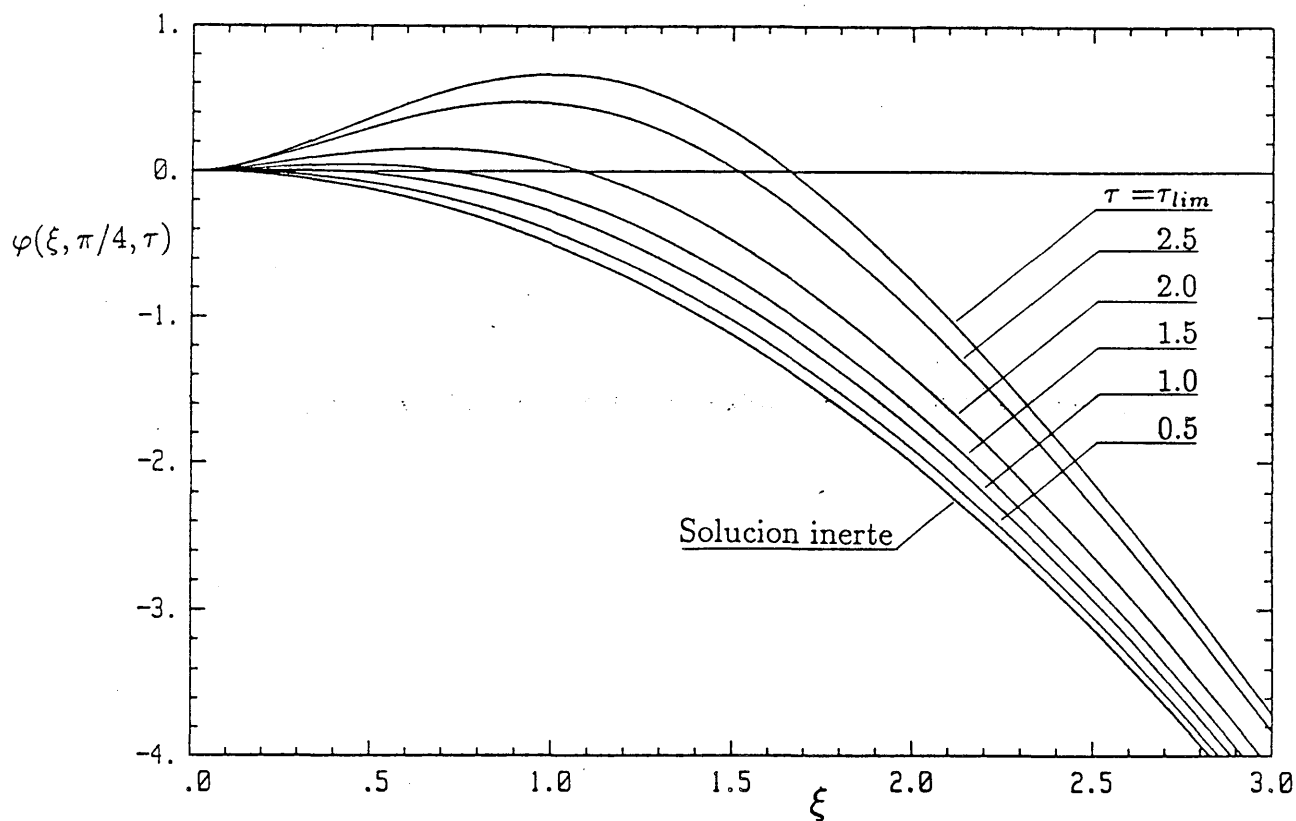


Figura 3.7 Temperatura en $\theta = \pi/4$ y distintos valores de τ en función de la variable de semejanza.

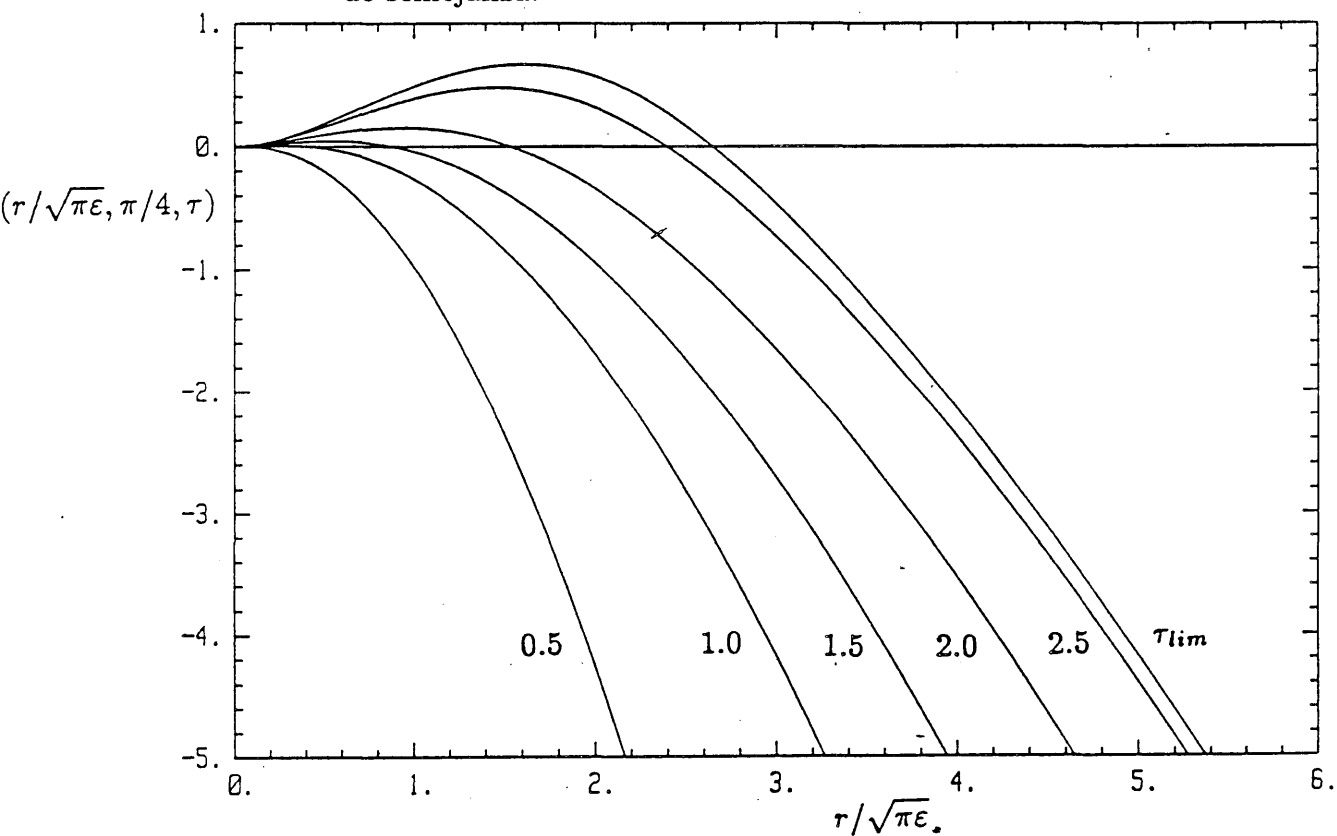


Figura 3.8 Temperatura en $\theta = \pi/4$ y distintos valores de τ en función de la distancia al origen.

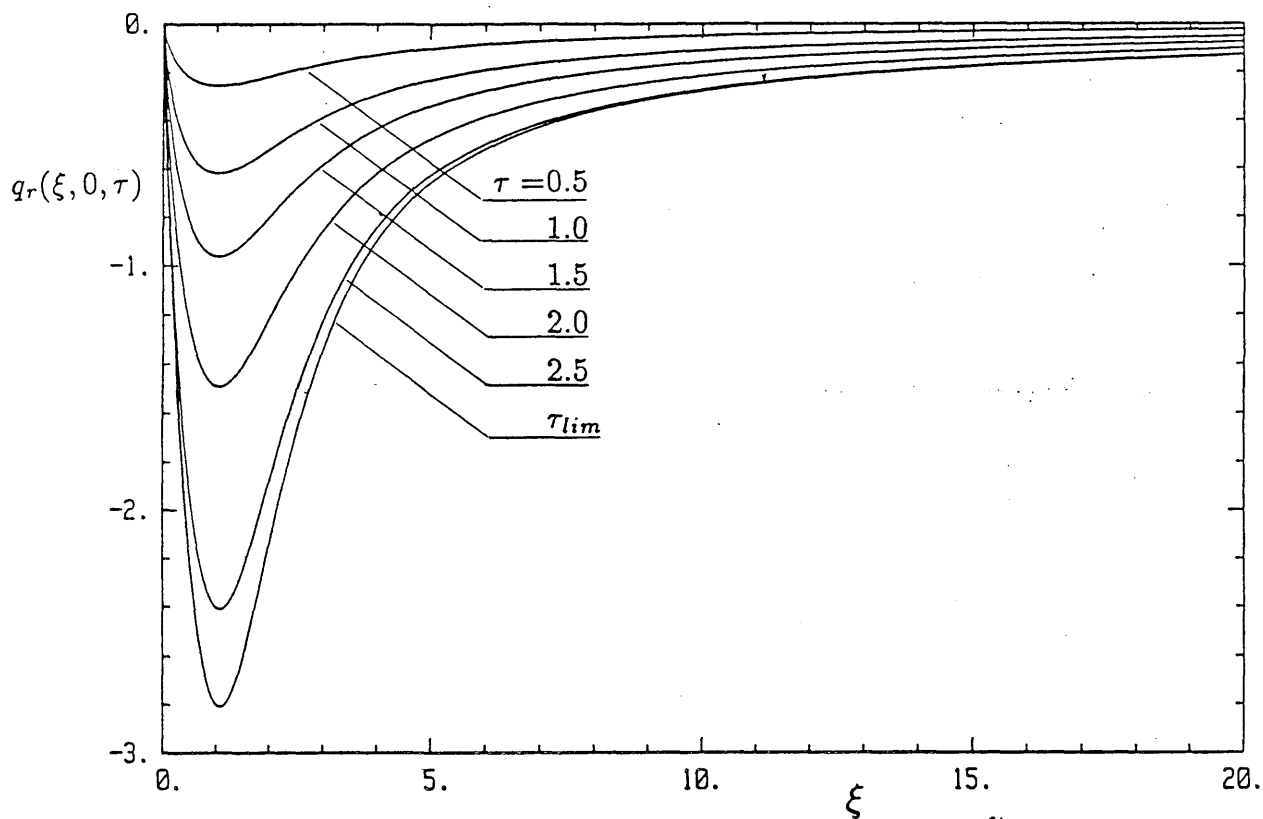


Figura 3.9 Flujo de calor en $\theta = 0$ generado por la reacción para distintos valores de τ .

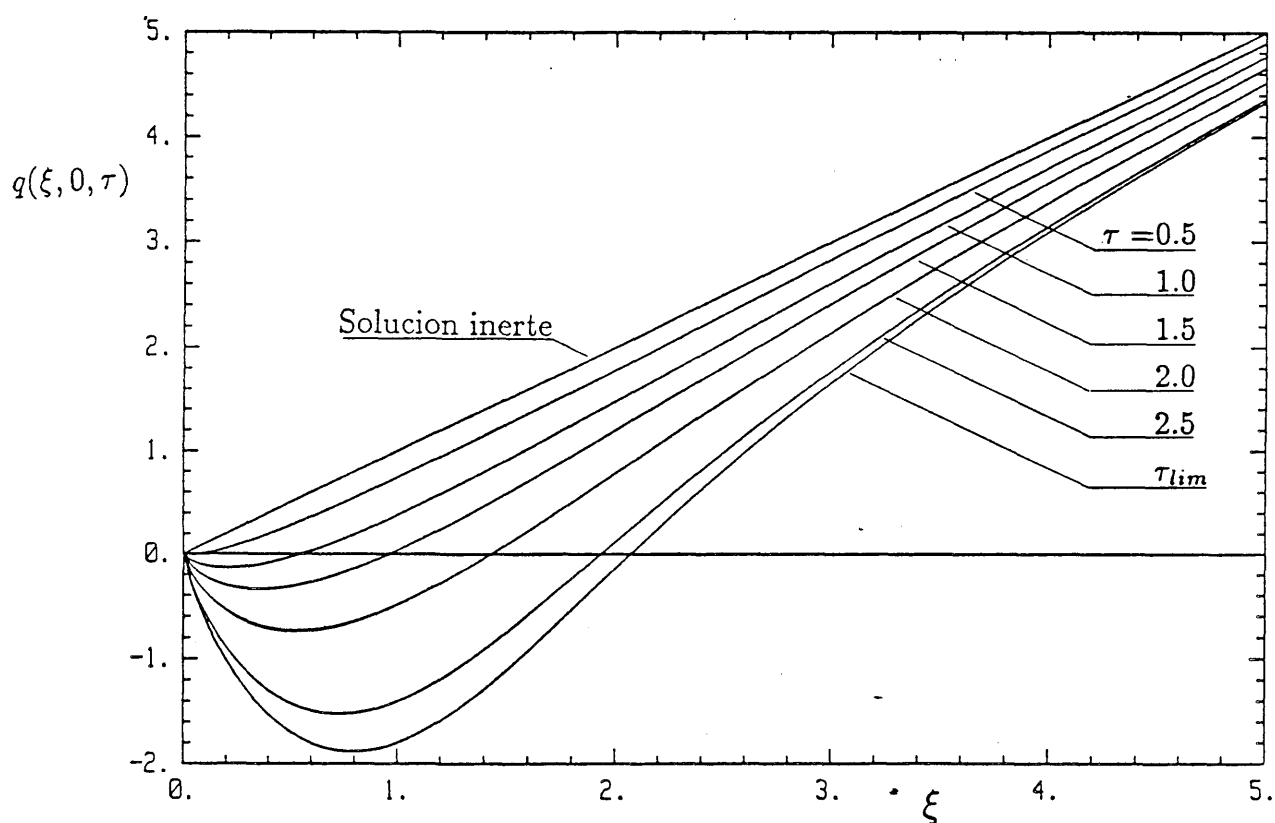


Figura 3.10 Flujo de calor total en $\theta = 0$ para distintos valores de τ .

APENDICE 3.1

EXISTENCIA DE SOLUCION PARA EL PROBLEMA (3.10)

Consideremos el problema:

$$\Delta u + \lambda \exp \left[u - \frac{1}{2} r^2 \operatorname{sen} 2\theta \right] = 0 \quad (\text{A.3.1.1})$$

$$u(r, 0) = u(r, \pi/2) = u_r(\infty, \theta) = 0$$

definido en el dominio $\Omega =]0, \infty[\times]0, \pi/2[$ con $\lambda \in R^+$.

Obsérvese en primer lugar que cuando $r \rightarrow \infty$ la ecuación se reduce a la de Laplace cuyas soluciones que verifican $u_r(\infty, \theta) = 0$ verifican igualmente $u(\infty, \theta) = 0$. Y recíprocamente, las soluciones de $\Delta u = 0$ con $u(\infty, \theta) = 0$ verifican asimismo $u_r(\infty, \theta) = 0$. En consecuencia el estudio de la existencia de solución para el problema (A.3.1.1) puede efectuarse a través del problema análogo con condiciones de Dirichlet:

$$\begin{aligned} \Delta u + \lambda \exp \left[u - \frac{1}{2} r^2 \operatorname{sen} 2\theta \right] &= 0 \quad \text{en } \Omega \\ u &= 0 \quad \text{en } \partial\Omega \end{aligned} \quad (\text{A.3.1.2})$$

Para ello recurriremos a los principios del máximo para ecuaciones elípticas en dominios acotados (Hopf) y no acotados (Phragmén-Lindelöf).

Consideremos el problema lineal:

$$\begin{aligned} \Delta u + \lambda f(r, \theta) \exp \left[-\frac{1}{2} r^2 \operatorname{sen} 2\theta \right] &= 0 \quad \text{en } \Omega \\ u &= 0 \quad \text{en } \partial\Omega \end{aligned} \quad (\text{A.3.1.3})$$

donde f es una función estrictamente positiva y acotada en Ω . El teorema de Phragmén-Lindelöf [PW, p.94] asegura que u es no negativa. La solución de (A.3.1.3) puede buscarse como límite de la siguiente sucesión de problemas lineales:

$$\begin{aligned} \Delta u_n + \lambda f(r, \theta) \exp \left[u - \frac{1}{2} r^2 \operatorname{sen} 2\theta \right] &= 0 \quad \text{en } D_n =]0, n[\times]0, \pi/2[\\ u_n &= 0 \quad \text{en } \partial D_n \end{aligned} \quad (\text{A.3.1.4})$$

Mediante el principio del máximo [PW, p.61] obtenemos:

$$0 \leq u_1 \leq u_2 \leq \dots \leq u_n \leq \dots$$

pues

- (i) $\Delta u_n < 0$ en D_n y $u_n = 0$ en ∂D_n y, por tanto, $u_n \geq 0$ en D_n , y
- (ii) $\Delta(u_{n+1} - u_n) = 0$ en D_n y $(u_{n+1} - u_n) \geq 0$ en ∂D_n y, por tanto, $u_{n+1} \geq u_n$ en D_n .

La función $\varphi(r, \theta)$ definida en Ω mediante

$$\varphi(r, \theta) = \lambda k \left\{ \frac{1}{r^2} \left(1 - \exp \left[-\frac{1}{2} r^2 \sin 2\theta \right] \right) + \frac{1}{9} \sin 2\theta \right\} \quad (\text{A.3.1.5})$$

siendo $k \geq f(r, \theta)$ en Ω , verifica

- (i) $\Delta \varphi + \lambda k \exp \left[-\frac{1}{2} r^2 \sin 2\theta \right] = -\frac{4\lambda k}{r^4} \left[(1+x)e^{-x/2} - 1 + \frac{1}{9}x \right] \leq 0$
- (ii) $0 \leq \varphi \leq \frac{11}{18} \lambda k$

donde $x = r^2 \sin 2\theta$, que junto con (A.3.1.4) permite escribir:

$$\Delta(u_n - \varphi) + \lambda(f(r, \theta) - k) \exp \left[-\frac{1}{2} r^2 \sin 2\theta \right] \geq 0 \quad \text{en } D_n$$

$$u_n - \varphi \leq 0 \quad \text{en } \Gamma$$

siendo $\Gamma = \partial D_n - \{r = 0\}$ pues φ no está definida en el origen. La falta de continuidad de φ en $D_n \cup \partial D_n$ impide aplicar el principio del máximo en la forma establecida en [PW, p.61] siendo necesario recurrir al principio de Phragmén-Lindelöf [PW, pp.97-99] que, imponiendo restricciones al crecimiento de la función, permite extender los principios del máximo a dominios no acotados y a dominios acotados cuando las condiciones de contorno no están totalmente especificados. Mediante éste y la función $w(r) = \log(2n^2/r^2)$, la condición para que $u_n - \varphi \leq 0$ en Ω puede escribirse como:

$$\liminf_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\sup_{0 < \theta < \pi/2} (u_n - \varphi)}{w(r)} \right] \leq 0$$

Teniendo en cuenta que $0 \leq \varphi \leq (11/18)\lambda k$ y que para $r \rightarrow 0$ es $u_n \leq \lambda k r^2 \log(1/r)$ pues $\Delta u_n > -\lambda k$ es fácil comprobar que el anterior límite es nulo, con lo cual $\varphi \geq u_n$ en Ω .

Para demostrar que si λ es suficientemente grande el problema (A.3.1.2) carece de solución considérese la función $\varphi = \frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta e^{-r^2/2}$ que verifica:

$$(i) \quad \varphi \geq 0 \quad \text{en } \Omega$$

$$(ii) \quad \varphi = 0 \quad \text{en } \partial\Omega$$

$$(iii) \quad \Delta\varphi = \frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta (r^2 - 6)e^{-r^2/2} = (r^2 - 6)\varphi$$

es tal que

$$\begin{aligned} \Delta\varphi + \lambda_0 \varphi e^{-\frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta} &= \varphi e^{-\frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta} \left(\lambda_0 - (6 - r^2)e^{\frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta} \right) \\ &\geq \varphi e^{-\frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta} \left(\lambda_0 - (6 - r^2)e^{r^2/2} \right) \geq 0 \end{aligned}$$

si $\lambda_0 \geq \max_{0 < r < \infty} (6 - r^2)e^{r^2/2} = 2e^2$.

Si u es solución acotada de (A.3.1.2) la segunda identidad de Green establece:

$$\int_{\Omega} \varphi \Delta u = \int_{\Omega} u \Delta \varphi$$

y en consecuencia

$$-\int_{\Omega} \varphi \exp \left[u - \frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta \right] = \int_{\Omega} u \Delta \varphi \geq -\int_{\Omega} u \lambda_0 \varphi e^{-\frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta}$$

es decir:

$$\lambda \int_{\Omega} \varphi \exp \left[u - \frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta \right] \leq \lambda_0 \int_{\Omega} u \varphi \exp \left[-\frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta \right]$$

que al ser $e^u \geq u$ es imposible si $\lambda \geq \lambda_0$.

Por tanto si $\lambda \geq 2e^2$ el problema (A.3.1.2) carece de solución acotada.

APENDICE 3.2

SOLUCION DEL PROBLEMA LINEAL (3.11)

Consideremos el problema de Poisson:

$$r^2 \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + r \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = -r^2 \exp \left[-\frac{1}{2} r^2 \sin 2\theta \right] \quad (\text{A.3.2.1a})$$

$$u(\infty, \theta) = u(r, 0) = u_\theta(r, \pi/4) = 0 \quad (\text{A.3.2.1b})$$

Sea $u(r; \theta)$ una función que a cada $r \in [0, \infty[$ le hace corresponder una función $f(\theta)$ definida en $[0, \pi/4]$ que verifica $f(0) = f_\theta(\pi/4) = 0$. Más exactamente:

$$u(r; \theta) : [0, \infty[\rightarrow V \quad (\text{A.3.2.2})$$

siendo

$$V = \left\{ f \in L^2 \left(0, \frac{\pi}{4} \right), f' \in L^2 \left(0, \frac{\pi}{4} \right), f(0) = f'(\pi/4) = 0 \right\} \quad (\text{A.3.2.3})$$

Sea la sucesión de funciones $(\omega_n) \in V$ definida mediante:

$$\omega_n(\theta) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \sin \lambda_n \theta \quad (\text{A.3.2.4})$$

con $\lambda_n = 2(2n-1)$, que, evidentemente, constituye una base ortonormal de V . Respecto de esta base la función u puede expresarse como:

$$u(r; \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} v_n(r) \omega_n(\theta) \quad (\text{A.3.2.5})$$

llevando esta serie a (A.3.2.1) y teniendo en cuenta que, a partir de la definición de V , es uniformemente convergente se obtiene la siguiente colección de ecuaciones y condiciones de contorno para cada $v_n(r)$:

$$r^2 v_n'' + r v_n' - \lambda_n^2 v_n + r^2 g_n(r) = 0 \quad (\text{A.3.2.6a})$$

$$v_n(0) = v_n(\infty) = 0 \quad (\text{A.3.2.6b})$$

donde

$$g_n(r) = \int_0^{\pi/4} \omega_n(\theta) \exp\left(-\frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta\right) d\theta \quad (\text{A.3.2.7})$$

Resolviendo (A.3.2.6) para cada n se obtiene la solución de (A.3.2.1). Como veremos a continuación no es posible obtener una solución analítica de (A.3.2.6), sin embargo podremos encontrar su comportamiento para $r \rightarrow 0$ y $r \rightarrow \infty$ que, por otra parte, es necesario si se desea realizar la integración de (A.3.2.6) de forma numérica.

Debido a las diferentes situaciones que se presentan cuando $n = 1$ y $n \neq 1$ analizaremos ambas en forma separada.

1.- $n=1$

El problema a resolver es:

$$r^2 v_n'' + r v_n' - 4v_1 + r^2 g_1(r) = 0 \quad (\text{A.3.2.8a})$$

$$v_1(0) = v_1(\infty) = 0 \quad (\text{A.3.2.8b})$$

La función $g_1(r) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \int_0^{\pi/4} \sin 2\theta \exp\left(\frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta\right) d\theta$ puede expresarse mediante las funciones modificadas de Struve y Bessel [GR, p.316]:

$$g_1(r) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \left[\frac{r^2}{2} + \frac{\pi r^2}{2} (L_1(r^2/2) - I_1(r^2/2)) \right]$$

utilizando los desarrollos de L_1 y I_1 [AB, pp.498 y 375] se llega a:

$$g_1(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{m=0}^{\infty} a_m r^{2m} \quad (\text{A.3.2.9})$$

con

$$a_m = \begin{cases} 1 & m = 0 \\ -\pi / (2^{m+1}(m-1)!!(m+1)!!) & m = 2k-1 \\ 1 / (2^m(m-1)!!(m+1)!!) & m = 2k \end{cases}$$

Dada la forma de (A.3.2.9) sería posible calcular la función v_1 como una serie de potencias. No obstante nos limitaremos a obtener los comportamientos asintóticos de v_1 para $r \rightarrow 0$ y $r \rightarrow \infty$. A partir de (A.3.2.7) desarrollando para $n = 1$ y $r \rightarrow 0$ ó $r \rightarrow \infty$, o a partir del comportamiento asintótico para $L_1 - I_1$ [AB, p.498] se encuentra:

$$g_1(r \rightarrow \infty) = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \left(\frac{4}{r^4} + \frac{48}{r^8} + \frac{2880}{r^{12}} + \mathcal{O}(r^{-16}) \right)$$

$$g_1(r \rightarrow 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(1 - \frac{\pi}{8}r^2 + \frac{1}{12}r^4 - \frac{\pi}{256}r^6 + \mathcal{O}(r^8) \right)$$

que llevado a (A.3.2.8) permite calcular las soluciones particulares correspondientes y teniendo en cuenta que las soluciones generales son $r^2(r \rightarrow 0)$ y $r^{-2}(r \rightarrow \infty)$ conduce a:

$$v_1(r \rightarrow \infty) = b_\infty \frac{1}{r^2} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[\frac{\ln r}{r^2} \right] + \mathcal{O}(r^{-10}) \quad (\text{A.3.2.10})$$

$$v_1(r \rightarrow 0) = b_o r^2 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[\frac{1}{4} r^2 \ln r - \frac{\pi}{96} r^4 + \frac{1}{384} r^6 \right] + \mathcal{O}(r^8) \quad (\text{A.3.2.11})$$

siendo b_o y b_∞ constantes a determinar con la condición de que la solución de (A.3.2.8) con los valores iniciales $v_1(r_o)$ y $v_1'(r_o)$ ($r_o \ll 1$) deducidos de (A.3.2.11) tenga en $r_\infty \gg 1$ el comportamiento dado por (A.3.2.10). En lugar de (A.3.2.10) es preferible desde el punto de vista del cálculo numérico emplear la condición equivalente:

$$2v_1(r_\infty) + r_\infty v_1'(r_\infty) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{1}{r_\infty^2} + \frac{6}{r_\infty^6} + \frac{240}{r_\infty^{10}} \right) + \mathcal{O}(r_\infty^{-12})$$

que se encuentra al resolver la ecuación haciendo $f = r^2 v_1$ cuando $r \rightarrow \infty$. Integrando numéricamente (A.3.2.8) se obtienen los valores:

$$b_o = .092034 \dots$$

$$b_\infty = .030805 \dots$$

2.- $n > 2$

Para $n \geq 2$ es mucho más complicado generar expresiones análogas a (A.3.2.9) para $g_n(r)$. Mostraremos únicamente que si bien todos los armónicos v_n contienen un término logarítmico tanto para $r \rightarrow 0$ como $r \rightarrow \infty$, éste no aparece nunca en el término de menor orden del desarrollo de v_n en potencias de r .

2.a.- Comportamiento para $r \rightarrow \infty$

Utilizando la fórmula de Moivre para expresar $\sin \lambda_n \theta$ en función de $t = \sin 2\theta$ (A.3.2.7) puede escribirse:

$$g_n(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^1 \left\{ \sum_{k=0}^{n-1} \binom{2n}{2k+1} (1-t^2)^{n-k} (-t^2)^k - \sum_{k=0}^n \binom{2n}{2k} (1-t^2)^{n-k} (-t^2)^k \right\} \frac{t e^{-r^2 t/2}}{\sqrt{1-t^2}} dt \quad (\text{A.3.2.12})$$

Debido al término $e^{-r^2 t/2}$, cuando $r \gg 1$ el integrando sólo es no nulo si $t = \mathcal{O}(r^{-2})$. Considerando su desarrollo para $t \ll 1$, (A.3.2.12) es:

$$g_n(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^1 \{2n-1\} + \mathcal{O}(t^2) \} t e^{-r^2 t/2} dt \quad (\text{A.3.2.13})$$

Con $s = r^2 t/2$ (A.3.2.13) se reduce a:

$$g_n(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2\lambda_n}{r^4} \int_0^\infty s e^{-s} ds + o\left(\frac{1}{r^4}\right) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2\lambda_n}{r^4} + o(r^{-4})$$

La solución general de (A.3.2.6) es $b_{n,\infty} r^{-\lambda_n}$ y el primer término de la solución particular es $\mathcal{O}(1/r^2)$. Todos los demás términos decrecen de modo algebraico excepto el correspondiente a $r^{-\lambda_n}$ que lo hace de la forma $r^{-\lambda_n} \ln r$. Por tanto puede escribirse:

$$v_n(r \rightarrow \infty) = \frac{2\lambda_n}{\lambda_n^2 - 4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r^2} + \mathcal{O}(r^{-4}) \quad (\text{A.3.2.14})$$

2.b.-Comportamiento para $r \rightarrow 0$

A partir del desarrollo en potencias de la función exponencial es:

$$\exp\left(-\frac{1}{2}r^2 \sin 2\theta\right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2^k k!} r^{2k} \sin^k 2\theta$$

que llevado a (A.3.2.7) permite escribir $g_n(r)$ en la forma:

$$g_n(r) = \sum_{k=0}^{\infty} C_{n,k} r^{2k}$$

siendo

$$C_{n,k} = \int_0^{\pi/4} \frac{(-1)^k}{2^k k!} \sin^k 2\theta \sin \lambda_n \theta d\theta$$

La solución general de (A.3.2.6) cuando $r \rightarrow 0$ es $b_{n,o} r^{\lambda_n}$ y la solución particular para cada término $C_{n,k} r^{2k}$ es $(C_{n,k} / (\lambda_n^2 - 4(k+1)^2)) r^{2(k+1)}$ excepto si $k+1 = 2n-1$ en cuyo caso es $(C_{n,2n-2} / 2\lambda_n) r^{\lambda_n} \ln r$. Por tanto la solución completa es:

$$v(r \rightarrow 0) = b_{n,o} r^{\lambda_n} - \frac{C_{n,2n-2}}{2\lambda_n} r^{\lambda_n} \ln r + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq 2n-2}}^{\infty} \frac{C_{n,k}}{(\lambda_n^2 - 4(k+1)^2)} r^{2(k+1)}$$

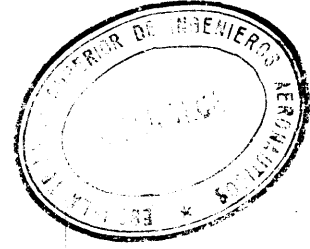
que puede siempre escribirse como:

$$v_n(r \rightarrow 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2}{\lambda_n(\lambda_n^2 - 4)} r^2 + o(r^2) \quad (\text{A.3.2.15})$$

Teniendo en cuenta (A.3.2.10), (A.3.2.11), (A.3.2.14 y (A.3.2.15) los comportamientos asintóticos para u son:

$$u(r \rightarrow \infty) = \frac{4}{\pi} \frac{1}{r^2} \left[(\ln r + .03861) \operatorname{sen} 2\theta + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\lambda_n}{\lambda^2 - 4} \operatorname{sen} \lambda_n \theta \right] + o(r^{-2}) \quad (\text{A.3.2.16})$$

$$u(r \rightarrow 0) = \frac{4}{\pi} r^2 \left[\left(\frac{1}{4} \ln \frac{1}{r} + .11535 \right) \operatorname{sen} 2\theta + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\lambda_n(\lambda_n^2 - 4)} \operatorname{sen} \lambda_n \theta \right] + o(r^2)$$



APENDICE 3.3

SOLUCION DEL PROBLEMA EXTERIOR (3.30)

Una vez determinadas las condiciones de acoplamiento entre la solución de la capa límite y la exterior el problema para determinar ψ_{ext} puede formularse como:

$$\Delta U = 0$$

(A.3.3.1)

$$U(1, \theta) - g_1(\theta) = U(\eta, 0) - \tau/\eta^2 = U_\theta(\eta, \pi/4) = U_\eta(\infty, \theta) = 0$$

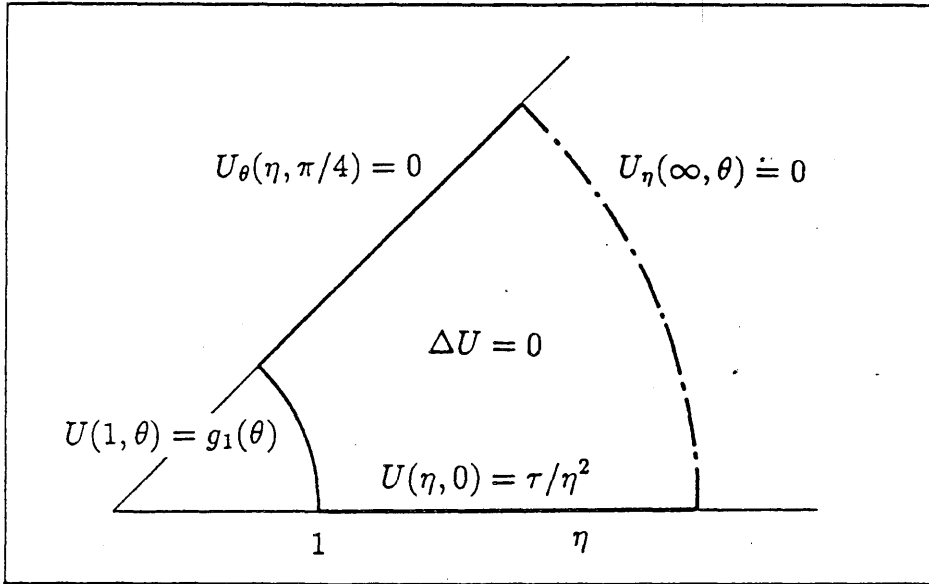


Figura A.3.3.1 Esquema del problema exterior.

De este problema que representa la conducción de calor estacionaria en la región $]1, \infty[\times]0, \pi/4[$ con fuentes en $\eta = 1$ y $\theta = 0$ y condiciones adiabáticas en $\eta = \infty$ y $\theta = \pi/4$ precisamos obtener dos tipos de información diferente. Por una parte calcular $\partial\psi(\xi_\infty, \theta)/\partial\xi$ que se utilizará como condición de contorno para el problema interior y, por otra, calcular el comportamiento asintótico de la solución cuando $\xi \rightarrow \infty$. Mediante $F = U - \tau/\eta^2$ transformamos (A.3.3.1) en un problema de Poisson con condiciones de contorno homogéneas excepto en $\eta = 1$:

$$\Delta F = -4\tau/\eta^4$$

(A.3.3.2)

$$F(1, \theta) - g_1(\theta) + \tau = F(\eta, 0) = F_\theta(\eta, \pi/4) = F_\eta(\infty, \theta) = 0$$

1.- Cálculo de $\partial\psi(\xi_\infty, \theta, \tau)/\partial\xi$

Si, aprovechando la linealidad de (A.3.3.2), descomponemos F en la suma $F_1 + F_2$ el problema (A.3.3.2) se desdobra en un problema de Laplace para F_1 con condiciones no homogéneas

$$\Delta F_1 = 0$$

$$F_1(1, \theta) - g_1(\theta) + \tau = F_1(\eta, 0) = F_{1,\theta}(\eta, \pi/4) = F_{1,\eta}(\infty, \theta) = 0 \quad (\text{A.3.3.3})$$

y otro de Poisson para F_2 con condiciones homogéneas

$$\Delta F_2 = -4t/\eta^4$$

$$(\text{A.3.3.4})$$

$$F_2(1, \theta) = F_2(\eta, 0) = F_{2,\theta}(\eta, \pi/4) = F_{2,\eta}(\infty, \theta) = 0$$

El problema (A.3.3.3) se resuelve mediante las técnicas de separación de variables análogamente al procedimiento seguido en el apéndice 3.2, obteniéndose la siguiente expresión para F_1 :

$$F_1 = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \eta^{-\lambda_n} \sqrt{\frac{8}{\pi}} \sin \lambda_n \theta \quad (\text{A.3.3.5})$$

donde $\lambda_n = 2(2n - 1)$ y $a_n = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \int_0^{\pi/4} (g_1(\theta) - \tau) \sin \lambda_n \theta d\theta$. Debido a que $g_1(\theta) - \tau$ verifica $g_1(0) - \tau = d(g_1(\pi/4) - \tau)/d\theta = 0$ es posible generar a partir de $g_1(\theta) - \tau$ una función \tilde{g} definida en $[-\pi, \pi]$ que sea antisimétrica y periódica. Si suponemos que g_1 es de clase C^2 entonces \tilde{g} es de clase C^2 a trozos y de acuerdo con el resultado acerca del orden de magnitud de los coeficientes del desarrollo en serie de Fourier [CH, p.74] se verifica que $|a_n| = \mathcal{O}(\lambda^{-2})$. Si en lugar de la hipótesis anterior suponemos que g_1 es de clase C^1 y que su derivada segunda cumple las condiciones de Dirichlet entonces \tilde{g} verifica análogas condiciones y según [CF, p.130] es $|a_n| = \mathcal{O}(\lambda_n^{-3})$. Ambas hipótesis son razonables y, en consecuencia, los coeficientes tienden a cero de forma suficientemente rápida y la serie (A.3.3.5) puede truncarse en un valor de n relativamente pequeño.

La solución de (A.3.3.4) puede construirse mediante la función de Green apropiada. Usando como variables (η, θ) y (ξ, φ) la función de Green para la región $[1, \infty] \times [0, 2\pi]$ con las condiciones homogéneas de Dirichlet en $\eta = 1$ y de Neumann en $\eta = \infty$ es:

$$\tilde{G}(\eta, \theta; \xi, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \ln \frac{1 + \xi^2 \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta - \varphi)}{\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta - \varphi)}$$

La función de Green, G , para la región $[1, \infty[\times [0, \pi/2]$ con condiciones homogéneas de Dirichlet en $\eta = 1$, $\theta = 0$ y $\theta = \pi/2$ y de Neumann en $\eta = \infty$ se calcula a partir de \tilde{G} mediante:

$$\begin{aligned} G(\eta, \theta; \xi, \varphi) &= \tilde{G}(\eta, \theta; \xi, \varphi) + \tilde{G}(\eta, \theta; \xi, \pi + \varphi) - \tilde{G}(\eta, \theta; \xi, \pi - \varphi) - \tilde{G}(\eta, \theta; \xi, -\varphi) \\ &= -\frac{1}{4\pi} \ln \left\{ \frac{1 + \xi^2 \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta - \varphi)}{\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta - \varphi)} \cdot \frac{1 + \xi^2 \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta - \varphi)}{\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta - \varphi)} \cdot \right. \\ &\quad \left. \frac{\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta + \varphi)}{1 + \xi^2 \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta + \varphi)} \cdot \frac{\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta + \varphi)}{1 + \xi^2 \eta^2 - 2\xi\eta \cos(\theta + \varphi)} \right\} \end{aligned}$$

Por tanto F_2 es:

$$F_2(\eta, \theta) = - \int_1^\infty \xi d\xi \int_0^{\pi/2} \left(-\frac{4\tau}{\xi^4} \right) G(\eta, \theta; \xi, \varphi) d\varphi = -\frac{\tau}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\xi}{\xi^3} \int_0^{\pi/2} \ln\{\cdot\}$$

y derivando respecto de η se obtiene:

$$\frac{\partial F_2(1, \theta)}{\partial \eta} = -\frac{\tau}{\pi} \int_1^\infty \frac{d\xi}{\xi^3} \int_0^{\pi/2} \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \ln\{\cdot\} \right]_{\eta=1} d\varphi$$

Al calcular $\partial \ln\{\cdot\} / \partial \eta$ encontramos expresiones relacionadas con el núcleo de Poisson. Si denominamos

$$I(\theta; \xi) = \int_0^{\pi/2} \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \ln\{\cdot\} \right]_{\eta=1} d\varphi$$

y

$$[J(\theta; \xi, \varphi)]_\alpha^\beta = \int_\alpha^\beta \frac{\rho^2 - 1}{1 + \rho^2 - 2\rho \cos(\varphi - \theta)} d\varphi$$

se verifica:

$$I(\theta; \xi) = 2 \left([J(\theta; \xi, \varphi)]_0^{\pi/2} + [J(\theta; -\xi, \varphi)]_0^{\pi/2} - [J(-\theta; -\xi, \varphi)]_0^{\pi/2} - [J(\theta; \xi, \varphi)]_0^{\pi/2} \right)$$

Es fácil comprobar las siguientes igualdades:

$$[J(\theta; -\xi, \varphi)]_0^{\pi/2} = [J(\theta; \xi, \varphi)]_\pi^{3\pi/2}$$

$$[J(-\theta; -\xi, \varphi)]_0^{\pi/2} = [J(\theta; \xi, \varphi)]_\pi^{\pi/2}$$

$$[J(\theta; \xi, \varphi)]_0^{\pi/2} = [J(\theta; \xi, \varphi)]_{3\pi/2}^{2\pi}$$

con lo cual:

$$I(\theta; \xi) = 4 [J(\theta; \xi, \varphi)]_0^{\pi/2} + 4 [J(\theta; \xi, \varphi)]_\pi^{3\pi/2} - 2 [J(\theta; -\xi, \varphi)]_0^{\pi/2}$$

Cada una de las integrales que aparecen en la expresión anterior puede calcularse en el plano complejo mediante la teoría de residuos. El resultado final es:

$$I(\theta; \xi) = 8 \left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\xi^4 - 1}{2\xi^2 \operatorname{sen} 2\theta} \right)$$

de donde:

$$\frac{\partial F_2(1, \theta)}{\partial \eta} = -\frac{8\tau}{\pi} \int_1^\infty \left(\frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\xi^4 - 1}{2\xi^2 \operatorname{sen} 2\theta} \right) \frac{d\xi}{\xi^3}$$

y por tanto:

$$\frac{\partial F_2(1, \theta)}{\partial \eta} = -\frac{4\tau}{\pi} (\operatorname{sen} 2\theta \ln(\operatorname{sen} 2\theta) - 2\theta \cos 2\theta - \pi \operatorname{sen}^2 \theta)$$

Teniendo en cuenta (A.3.3.5) y que $F = F_1 + F_2 = \xi_\infty^2 \psi - \tau/\eta^2$ la expresión para $\partial \psi(\xi_\infty, \theta)/\partial \xi$ es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(\xi_\infty, \theta)}{\partial \xi} = & -\frac{2}{\xi_\infty^3} \left\{ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n \operatorname{sen} \lambda_n \theta + \right. \\ & \left. \tau \left(1 + 2\operatorname{sen}^2 \theta + \frac{2}{\pi} (2\theta \cos \theta - \operatorname{sen} 2\theta \ln(2\operatorname{sen} 2\theta)) \right) \right\} \end{aligned}$$

que es la función a emplear como condición de Neumann en el problema interior.

2.- Comportamiento asintótico de ψ cuando $\xi \rightarrow \infty$

Con las técnicas del método de separación de variables reseñadas en el apéndice anterior la solución de (A.3.3.2) puede expresarse como:

$$F(\eta, \theta) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} f_n(\eta) \operatorname{sen} \lambda_n \theta$$

Si desarrollamos el término $-4\tau/\eta^2$ en serie de Fourier obtenemos:

$$\frac{4\tau}{\eta^2} = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \Lambda \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} \operatorname{sen} \lambda_n \theta$$

siendo $\Lambda = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \frac{4\tau}{\eta^2}$ y $\lambda_n = 2(2n-1)$. Llevando estas expresiones a (A.3.3.2) encontramos la siguiente colección de problemas para las funciones $f_n(\eta)$:

$$\eta^2 f_n'' + \eta f_n' - \lambda_n^2 f_n + \frac{\Lambda}{\lambda_n} \frac{1}{r^2} = 0$$

que deben resolverse con las condiciones $f_n(1) = a_n$ y $f'_n(\infty) = 0$, donde los coeficientes a_n son los definidos anteriormente. La solución de esta ecuación es:

$$f_n(\eta) = \begin{cases} \left(a_1 + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \tau \ln \eta \right) \frac{1}{\eta^2} & n = 1 \\ a_n \frac{1}{\eta^{\lambda_n}} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{8}{\lambda_n(\lambda_n^2 - 4)} \tau \left(\frac{1}{\eta^2} - \frac{1}{\eta^{\lambda_n}} \right) & n \geq 2 \end{cases}$$

Por tanto la solución puede escribirse como:

$$F(\eta, \theta) = \left[\sqrt{\frac{8}{\pi}} a_1 + \frac{4}{\pi} \tau \ln \eta \right] \frac{\text{sen} 2\theta}{\eta^2} + \sum_{n=2}^{\infty} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} a_n + \frac{32\tau}{\pi \lambda_n(\lambda_n^2 - 4)} (\eta^{\lambda_n - 2} - 1) \right] \eta^{-\lambda_n} \text{sen} \lambda_n \theta$$

y teniendo en cuenta que $1 = \sum (8/\pi \lambda_n) \text{sen} \lambda_n \theta$ se llega a:

$$\psi(\xi, \theta) = \frac{1}{\xi^2} \left\{ \frac{4}{\pi} \tau \left(1 + \ln \frac{\xi}{\xi_{\infty}} \right) + \sqrt{\frac{8}{\pi}} a_1 \right\} \text{sen} 2\theta + \frac{1}{\xi^2} \sum_{n=2}^{\infty} \left\{ \left[\sqrt{\frac{8}{\pi}} a_n - \frac{32\tau}{32\tau} \pi \lambda_n (\lambda_n^2 - 4) \right] \left(\frac{\xi_{\infty}}{\xi} \right)^{4(n-1)} + \frac{8\lambda_n}{(\lambda_n^2 - 4)} \right\} \text{sen} \lambda_n \theta$$

Para $\xi \gg \xi_{\infty}$ el comportamiento asintótico es:

$$\psi(\xi \rightarrow \infty, \theta) = \frac{4}{\pi} \frac{\tau}{\xi^2} \left\{ \left(\ln \xi + 1 + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{a'_1}{\tau} \right) \text{sen} 2\theta + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{2\lambda_n}{(\lambda_n^2 - 4)} \text{sen} \lambda_n \theta \right\} + o(\xi^{-2})$$

que, como era de esperar, coincide con el correspondiente al problema lineal obtenido en (A.3.2.16).

APENDICE 3.4

DISCRETIZACION DE LOS OPERADORES DE (3.38)

Una vez realizado el cambio de variables que transforma el dominio $[0, \xi_\infty] \times [0, \pi/4]$ en el cuadrado de lado unidad, éste se subdivide mediante una malla que consta de $(m-1) \times (n-1)$ puntos interiores de forma que las coordenadas de los nodos verifican:

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{m-1} < x_m = 1$$

$$0 = y_0 < y_1 < \dots < y_{n-1} < y_n = 1$$

La presencia de la capa límite en la cual los gradientes de ψ son elevados y la discontinuidad de las derivadas segundas en el origen hacen necesario el empleo de una malla no uniforme tal que el menor espaciado en la variable y corresponda a $y = 0$ (capa límite) y en la variable x a $x = 0$ (zona de discontinuidad) mientras que el espaciado más grande se produzca en $x = 1$ e $y = 1$ donde las condiciones de contorno aseguran que las derivadas son pequeñas.

Como contrapartida a la mayor resolución en determinadas zonas que permiten las mallas de espaciado variable, el error de truncación es de menor orden que en el caso de mallas uniformes. En particular para las derivadas segundas se tiene $E_2 = \mathcal{O}(r_{i-1}h_{i-1})$ siendo $h_{i-1} = x_i - x_{i-1}$ y $r_{i-1} = h_i/h_{i-1} - 1$, en consecuencia para que sea lo más pequeño posible debemos emplear mallas cuya transición entre espaciados sea suave, es decir que cumplan $r_i = o(1)$ para todo i .

Las coordenadas x de los nodos se determinan mediante:

$$x(u) = -\log \left(1 - \frac{9}{10}u \right)$$

donde $u = i/m$ ($i = 0, 1, 2, \dots, m$). Los valores máximos de r_x para $m = 50$ y $m = 100$ son: $r_x(50) = .166$ y $r_x(100) = .086$. Las coordenadas y están definidas por [FL2, p.102]:

$$y(v) = av + (1-a) \frac{\text{Th}(bv)}{\text{Th}b}$$

con $v = j/n$ ($j = 0, 1, 2, \dots, n$). Esta malla presenta la ventaja de poseer una gran resolución en la zona cercana a $v = 0$ mientras que en el resto el espaciado es casi

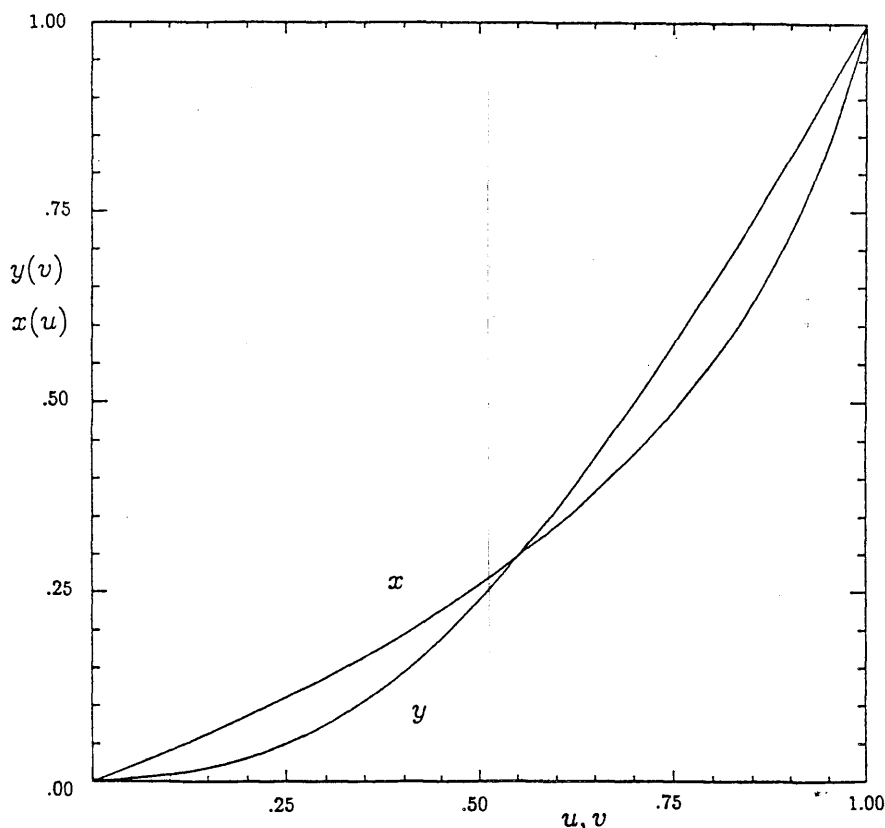


Figura A.3.4.1 Gráficas de las funciones $x(u)$ e $y(v)$ que definen la malla.

uniforme. Las constantes a y b se determinan con las condiciones $y(v_o) = \delta$ y $dy(0)/dv = (\delta/v_o)/c$ donde δ es el espesor de la capa límite, v_o es la fracción de puntos situados en la misma y c es una constante mayor que la unidad. La primera condición asegura que en $0 \leq y \leq \delta$ (capa límite) hay $v_o n$ puntos y la segunda determina a través de dy/dv el espaciado inicial como una fracción del que correspondería a una malla uniforme de $v_o n$ puntos entre 0 y δ . Con $v_o = 0.12$ y $c = 1.5$ los valores máximos de r_y son $r_y(50) = .193$ y $r_y(100) = .093$.

Si en cada nodo de la malla (x_i, y_j) ($i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$) asociamos el intervalo cerrado Ω_{ij} definido mediante:

$$\Omega_{ij} = [x_i - h_{i-1}/2, x_i + h_i/2] \times [y_j - k_{j-1}/2, y_j + k_j/2] \quad (\text{A.3.4.1})$$

con $h_m = k_n = 0$, podemos realizar la discretización de la ecuación (3.38) de forma similar a [BL, pp.183-186] integrando sobre Ω_{ij} y aproximando adecuadamente las integrales que se obtienen. Este método presenta dos ventajas sobre el empleo del desarrollo de Taylor pues, por una parte, genera un sistema de ecuaciones cuya matriz es simétrica y, por otra, las condiciones de Neumann se imponen de manera muy sencilla.

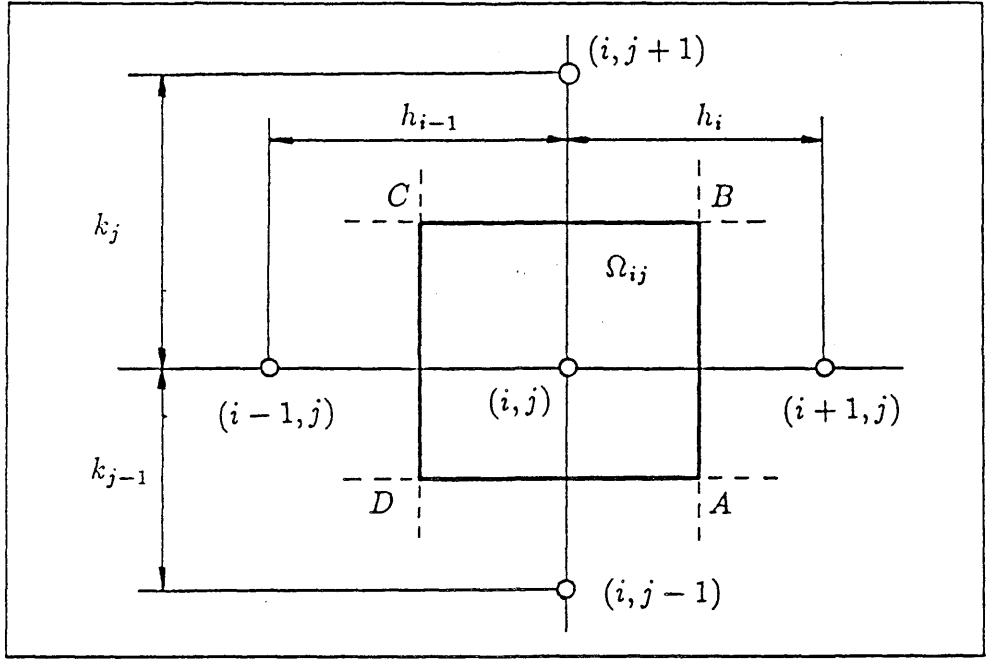


Figura A.3.4.2 Definición de Ω_{ij} .

La ecuación (3.38) puede escribirse, omitiendo los superíndices por simplicidad, como:

$$-\nabla \cdot (\nabla \delta \psi) - \tau f \delta \psi - f \delta \tau = \nabla \cdot (\nabla \psi) + \tau f \quad (\text{A.3.4.2})$$

donde $f = \exp [\psi - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta]$. Si multiplicamos por $d\Omega$ e integramos sobre Ω_{ij} obtenemos:

$$\int_{\Omega_{ij}} \nabla \cdot (\nabla \delta \psi) d\Omega - \tau \int_{\Omega_{ij}} f \delta \psi d\Omega - \delta \tau \int_{\Omega_{ij}} f d\Omega = \int_{\Omega_{ij}} \nabla \cdot (\nabla \psi) d\Omega + \tau \int_{\Omega_{ij}} f d\Omega$$

Mediante el teorema de la divergencia podemos poner:

$$\int_{\Omega_{ij}} \nabla \cdot (\nabla u) d\Omega = \int_{\partial \Omega_{ij}} \nabla u \cdot \bar{n} d\ell$$

Teniendo en cuenta que en el nuevo sistema de coordenadas x, y las expresiones para el gradiente, $d\Omega$ y $d\bar{\ell}$ son:

$$\nabla = \frac{\bar{e}_x}{se^{sx}} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\bar{e}_y}{\frac{\pi}{4}(e^{sx} - 1)} \frac{\partial}{\partial y}$$

$$d\Omega = \frac{\pi}{4} se^{sx} (e^{sx} - 1) dx dy$$

$$d\bar{\ell} = se^{sx} dx \bar{e}_x + \frac{\pi}{4} (e^{sx} - 1) dy \bar{e}_y$$

se obtiene

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_{ij}} \nabla u \cdot \bar{n} d\ell = & \frac{\pi}{4s} \left[\int_A^B \frac{\partial u}{\partial x} (1 - e^{-sx}) dy - \int_D^C \frac{\partial u}{\partial x} (1 - e^{-sx}) dy \right] \\ & - \frac{4s}{\pi} \left[\int_B^C \frac{\partial u}{\partial y} \frac{dx}{1 - e^{-sx}} - \int_D^A \frac{\partial u}{\partial y} \frac{dx}{1 - e^{-sx}} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.3.4.3})$$

Si en cada una de las integrales consideramos las derivadas constantes y las aproximamos en los nodos interiores mediante diferencias centradas llegamos a:

$$\int_{\partial\Omega_{ij}} \nabla u \cdot \bar{n} d\ell = a_{ij}u_{i,j-1} + b_{ij}u_{i-1,j} - c_{ij}u_{ij} + d_{ij}u_{i+1,j} + e_{ij}u_{i,j+1} \quad (\text{A.3.4.4})$$

donde

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \frac{4}{\pi} \ln \left(\frac{g_i}{g_{i-1}} \right) \frac{1}{k_{j-1}} \\ b_{ij} &= \frac{\pi}{4s} \frac{g_{i-1}}{1 + g_{i-1}} \frac{k_j + k_{j-1}}{2h_{i-1}} \\ d_{ij} &= \frac{\pi}{4s} \frac{g_i}{1 + g_i} \frac{k_j + k_{j-1}}{2h_i} \\ e_{ij} &= \frac{\pi}{4} \ln \left(\frac{g_i}{g_{i-1}} \right) \frac{1}{k_j} \\ c_{ij} &= a_{ij} + b_{ij} + d_{ij} + e_{ij} \\ g_i &= \exp [s(x_i + h_i/2)] - 1 \end{aligned} \quad (\text{A.3.4.5})$$

Las restantes integrales pueden aproximarse mediante

$$\int_{\Omega_{ij}} \omega(x, y) d\Omega = \omega(x_i, y_j) s_{ij}$$

donde las áreas s_{ij} están determinadas por:

$$s_{ij} = \int_{\Omega_{ij}} \frac{\pi s}{4} e^{sx} (e^{sx} - 1) dx dy = \frac{\pi}{4} \frac{k_j + k_{j-1}}{2} \frac{g_i^2 - g_{i-1}^2}{2} \quad (\text{A.3.4.6})$$

En los nodos interiores la ecuación discretizada puede finalmente escribirse como:

$$-a_{ij}\delta\psi_{i,j-1} - b_{ij}\delta\psi_{i-1,j} + (c_{ij} - \tau f_{ij})\delta\psi_{ij} - d_{ij}\delta\psi_{i+1,j} - e_{ij}\delta\psi_{i,j+1} - f_{ij}\delta\tau = r_{ij}$$

con

$$f_{ij} = s_{ij} \exp \left[\psi_{ij} - \frac{1}{2} \xi_i^2 \sin 2\theta_j \right]$$

$$r_{ij} = a_{ij}\psi_{i,j-1} + b_{ij}\psi_{i-1,j} - c_{ij}\psi_{ij} + d_{ij}\psi_{i+1,j} + e_{ij}\psi_{i,j+1} - \tau f_{ij}$$

Para imponer las condiciones de contorno tipo Dirichlet en $\theta = 0$ y $\xi = 0$ basta hacer en las ecuaciones con $i = 1$ ó $j = 1$:

$$\psi_{i,0} = \psi_{0,j} = \delta\psi_{i,0} = \delta\psi_{0,j} = 0$$

En $i = m$ y $1 \leq j \leq n - 1$ la condición de contorno a imponer es de la forma $\partial u / \partial x = p(y)$, siendo $p(y)$ una función conocida. Al realizar la integración sobre Ω_{mj} el valor de $\partial u / \partial x$ que aparece en \int_A^B de (A.3.4.3) se aproxima mediante el valor constante $p(y_j)$ obteniéndose:

$$\int_{\Omega_{ij}} \nabla u \cdot \bar{n} dl = a_{mj} u_{m,j-1} + b_{mj} u_{m-1,j} - c_{mj} u_{mj} + e_{mj} u_{m,j+1} + d_{mj} p_j$$

con

$$d_{mj} = \frac{\pi}{4s} \frac{g_m}{1 + g_m} \frac{k_j + k_{j-1}}{2}$$

$$c_{mj} = a_{mj} + b_{mj} + e_{mj}$$

y a_{mj} , b_{mj} , e_{mj} y g_m definidos en (A.3.4.5).

Teniendo en cuenta que en $x = 1$ se verifica $\partial(\delta\psi)/\partial x = 0$ y $\partial\psi/\partial x = q(y)$, la ecuación correspondiente a $i = m$, $1 \leq j \leq m - 1$ es:

$$\begin{aligned} -a_{mj} \delta\psi_{m,j-1} - b_{mj} \delta\psi_{m-1,j} + (c_{mj} - \tau f_{mj}) \delta\psi_{mj} - e_{mj} \delta\psi_{m,j+1} - f_{mj} \delta\tau \\ = r_{mj} + d_{mj} q_j \end{aligned}$$

con

$$r_{mj} = a_{mj} \psi_{m,j-1} + b_{mj} \psi_{m-1,j} - c_{mj} \psi_{mj} + e_{mj} \psi_{m,j+1} - \tau f_{mj}$$

Un razonamiento análogo permite establecer las ecuaciones para los nodos (i, n) ($i = 1, \dots, m - 1$):

$$\begin{aligned} -a_{in} \delta\psi_{i,n-1} - b_{in} \delta\psi_{i-1,n} + (c_{in} - \tau f_{in}) \delta\psi_{in} - d_{in} \delta\psi_{i+1,n} \\ - e_{in} \delta\psi_{i,n+1} - f_{in} \delta\tau = r_{in} \end{aligned}$$

con

$$c_{in} = a_{in} + b_{in} + d_{in}$$

$$r_{in} = a_{in} \psi_{i,n-1} + b_{in} \psi_{i-1,n} - c_{in} \psi_{in} + d_{in} \psi_{i+1,n} + \tau f_{in}$$

Y, finalmente, para el nodo (m, n) :

$$-a_{mn}\delta\psi_{m,n-1} - b_{mn}\delta\psi_{m-1,n} + (c_{mn} - \tau f_{mn})\delta\psi_{mn} - f_{mn}\delta\tau = r_{mn} + d_{mn}q_n$$

con

$$c_{mn} = a_{mn} + b_{mn}$$

$$r_{mn} = a_{mn}\psi_{m,n-1} + b_{mn}\psi_{m-1,n} - c_{mn}\psi_{mn} + \tau f_{mn}$$

El conjunto de las $m \times n$ ecuaciones puede escribirse de manera compacta como:

$$[A - \tau^\nu J^\nu] \delta X^\nu - F^\nu \delta \tau^\nu = R^\nu \quad (\text{A.3.4.7})$$

siendo A una matriz de tamaño $m \cdot n$ cuya estructura es pentadiagonal pero que puede considerarse tridiagonal por bloques de la forma:

$$A = \text{tri} \{L_j, M_j, N_j\} \quad j = 1, \dots, n$$

siendo L_j y N_j matrices diagonales de tamaño m cuyos elementos son, respectivamente, $-a_{ij}$ y $-e_{ij}$ ($i = 1, \dots, m$) y M_j una matriz tridiagonal de la forma:

$$M_j = \text{tri} \{-b_{ij}, c_{ij}, -d_{ij}\} \quad (i = 1, \dots, m)$$

De (A.3.4.5) se deduce que $a_{ij} = e_{i,j-1}$ y $b_{ij} = d_{i-1,j}$ y en consecuencia la matriz A es simétrica. J^ν es una matriz diagonal cuyos elementos son

$$J_k^\nu = f_{ij}^\nu \quad (k = i + m(j-1))$$

Los elementos de los vectores δX^ν y F^ν son:

$$\delta X_k^\nu = \delta\psi_{ij}^\nu$$

$$F_k^\nu = f_{ij}^\nu$$

R^ν es el vector de residuos que puede expresarse como

$$R^\nu = \tau^\nu F^\nu - AX^\nu + Q^\nu$$

siendo X^ν y Q^ν vectores definidos mediante

$$X_k^\nu = \psi_{ij}^\nu$$

$$Q_k = \begin{cases} 0 & \text{si } k \neq m \\ d_{mj}q_j & \text{si } k = jm \end{cases}$$

Finalmente debemos incluir la condición $\|\psi^\nu + \delta\psi^\nu\| = \alpha$. Si hubiésemos adoptado la norma de L_2 , $\|f\|_2 = \int f^2 dx$, al discretizar la expresión de la norma obtendríamos una ecuación del tipo:

$$\sum_{k=1}^{nm} s_{ij} (2X_k^\nu + \delta X_k^\nu) \delta X_k^\nu = \alpha - \|\psi^\nu\|$$

Esta ecuación es no lineal y por tanto sería mas conveniente emplear una forma "linealizada" de la misma tal como:

$$\sum_{k=1}^{nm} s_{ij} 2X_k^\nu \delta X_k^\nu = \alpha - \|\psi^\nu\|$$

que junto con (A.3.4.7) constituiría un sistema de $nm + 1$ ecuaciones lineales para las $nm+1$ incógnitas δX_k , $\delta\tau$.

La ventaja de emplear la norma del supremo es que es equivalente a la norma del máximo en el problema discretizado. Es decir, utilizamos como parámetro de continuación $\alpha = \max_{i,j} \{X_{ij}\}$. Aunque no podemos conocer a priori el nodo (i, j) donde tiene lugar el máximo sabemos que, debido a la simetría, está situado en $\theta = \pi/4$ ($j = n$). Mediante prueba y error puede determinarse la posición aproximada del mismo. Si el valor de X en este punto es conocido e igual a α , podemos eliminar una de las incógnitas resultando un sistema de nm ecuaciones para las $nm - 1$ incógnitas δX y la incógnita $\delta\tau$. Una vez calculada la solución determinamos mediante interpolación a lo largo de $y = 1$ la norma de ψ que, si hemos elegido adecuadamente el nodo donde $X = \alpha$, no diferirá apreciablemente de este valor. Los resultados muestran que el máximo de X tiene lugar en un nodo que permanece prácticamente invariable.

Sea (k, n) el nodo donde hacemos $X_p = \alpha$ y $\delta X_p = 0$ con $p = m(n-1) + k$. Al introducir estos valores en el sistema (A.3.4.7) es necesario reordenarlo para formar un único vector de incógnitas con δX y $\delta\tau$ y es conveniente hacerlo sin perder la estructura pentadiagonal de la matriz. Esto puede conseguirse sustituyendo la p -ésima ecuación por otra que esté desacoplada de las restantes y sea homogénea. Añadimos una ecuación en el lugar $nm + 1$ que es idéntica a la de lugar p , teniendo en cuenta que $\delta X_p \equiv 0$, y sustituimos todos los coeficientes de la ecuación p por ceros excepto el de la diagonal principal como se indica en la figura 3.

El sistema puede compactarse colocando el nuevo vector $-F$, $-F^*$, como la columna $nm + 1$ de la matriz y la incógnita $\delta\tau$ como la de lugar $nm + 1$, obteniendo el

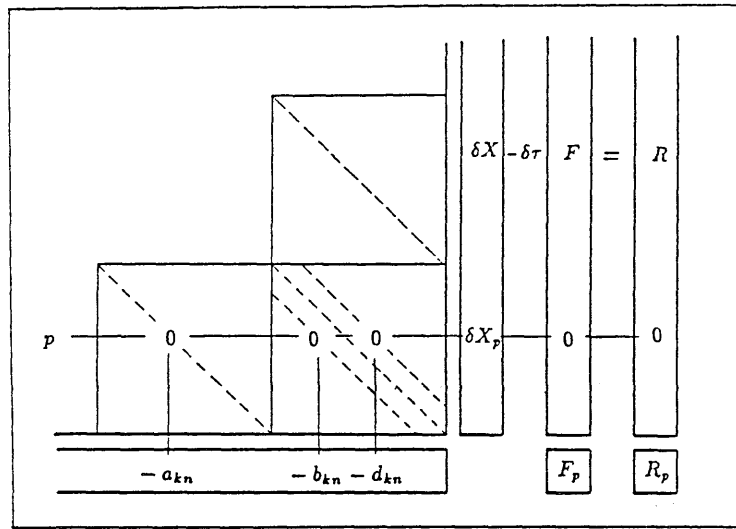


Figura A.3.4.3

sistema que se indica en la figura 4. F^* y R^* son los vectores definidos anteriormente con el elemento de lugar p nulo, H_j es la matriz tridiagonal $\text{tri} \{-b_{ij}, c_{ij} - \tau^\nu f_{ij}^\nu, -d_{ij}\}$ y los asteriscos indican que han sido modificados como se señaló antes.

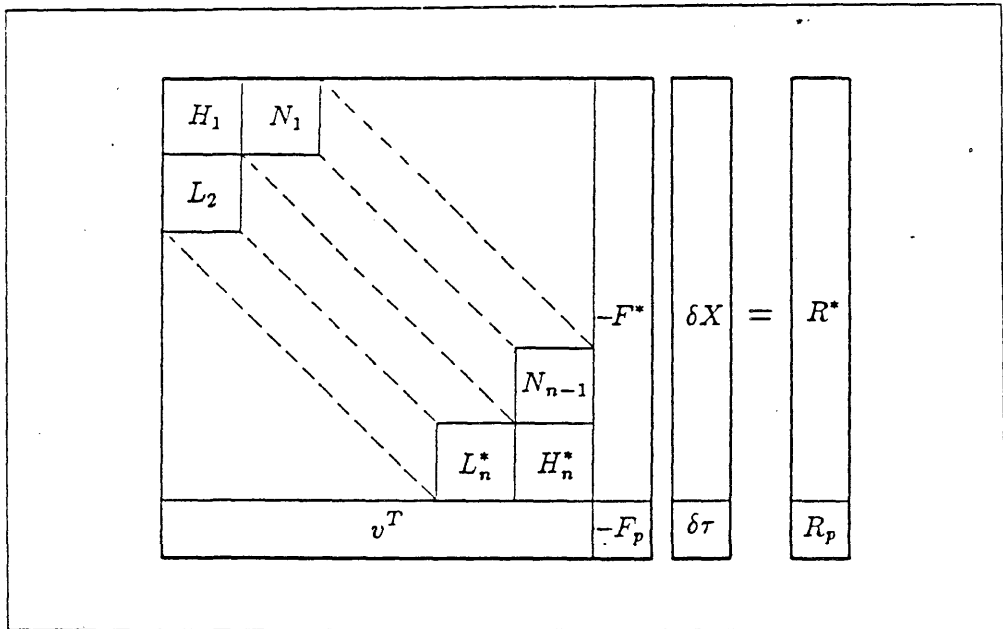


Figura A.3.4.4 Sistema de ecuaciones asociado al problema (3.10).

Los elementos del vector v son nulos excepto los de lugar $p-m$, $p-1$ y $p+1$ cuyos valores son $-a_{kn}$, $-b_{kn}$ y $-d_{kn}$, respectivamente. Finalmente podemos escribir el sistema como:

$$\begin{pmatrix} B^* & -F^* \\ v^T & -z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta X \\ \delta \tau \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^* \\ r \end{pmatrix} \quad (\text{A.3.4.8})$$

donde $B^* = A^* - \tau^\nu J^\nu$, $z = F_p$ y $r = R_p$.

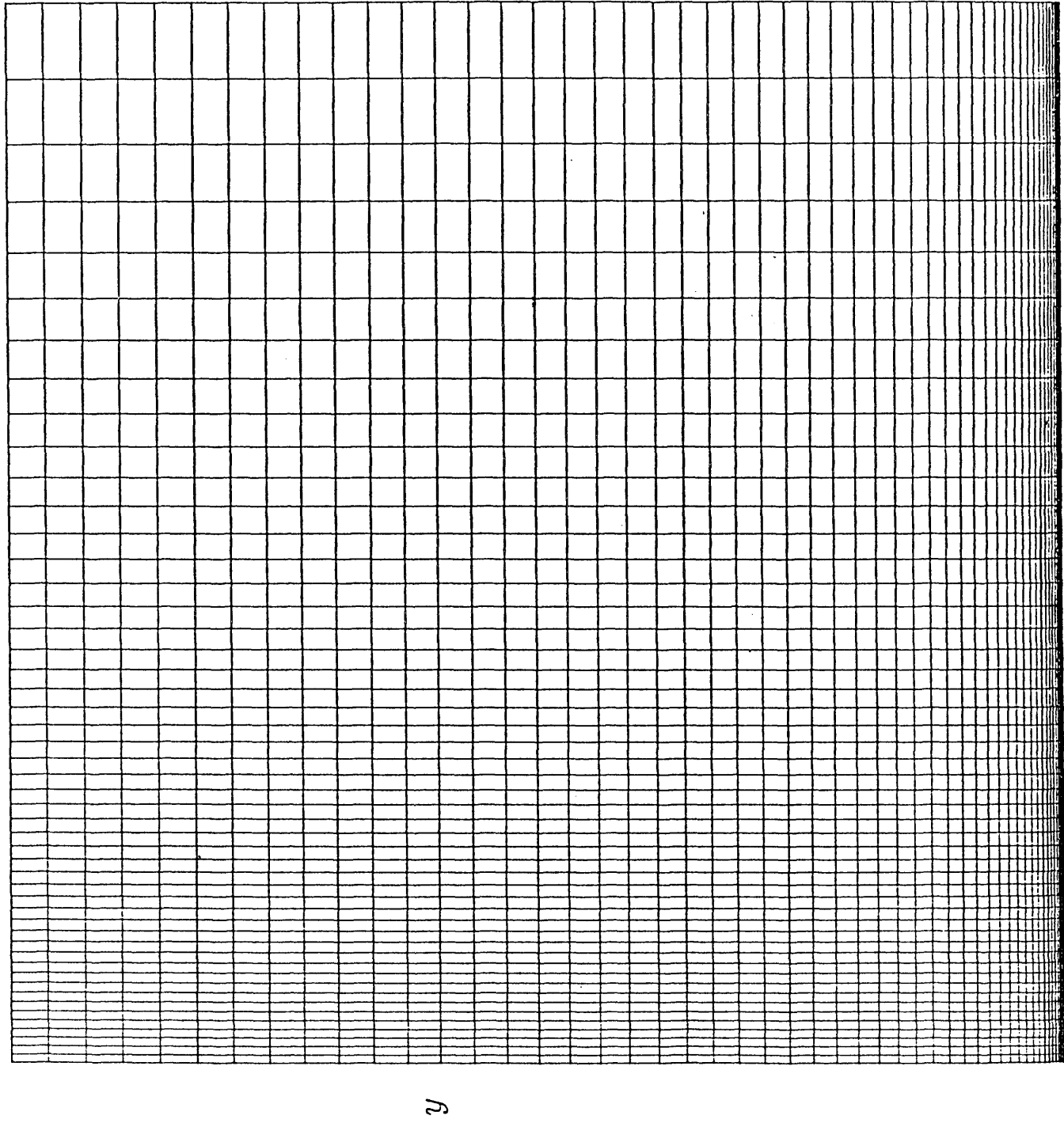


Figura A.3.4.5 Aspecto de la malla de 50×50 .

APENDICE 3.5

CORRECCION DEL TIEMPO DE IGNICION POR EFECTOS NO ESTACIONARIOS

El valor de τ_o que se ha obtenido al resolver el problema (3.10) debe considerarse como una primera aproximación al valor del tiempo de ignición, pues la zona de reacción deja de ser cuasiestacionaria cuando τ es próximo a τ_o y $\partial\psi/\partial\tau$ es mucho mayor que la unidad. Es posible, análogamente al caso unidimensional, diferenciar dos etapas en el proceso de ignición. Durante la primera etapa, que denominaremos inicial, los efectos no estacionarios son despreciables y, por tanto, la hipótesis cuasi-estacionaria es correcta. Esta etapa finaliza cuando surgen los efectos incipientes de ignición que cambian el orden de magnitud del término $\varepsilon\psi_\tau$, comenzando una segunda etapa, denominada de transición, en la cual debe retenerse la derivada temporal. La etapa de transición es muy corta en relación a la inicial y para analizarla debe determinarse, en primer lugar, la escala asociada a la misma. Esta puede deducirse de la estructura de la solución exterior, correspondiente a la etapa inicial, cuando $\tau_o - \tau \ll 1$.

Si la solución de (3.9) se busca como $\psi = \psi_o + \varepsilon\psi_1 + \varepsilon^2\psi_2 + \dots$ las ecuaciones y condiciones de contorno para ψ_o y ψ_1 son:

$$\Delta\psi_o + \tau \exp \left[\psi_o + \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta \right] = 0 \quad (\text{A.3.5.1a})$$

$$\psi_o(\xi, 0, \tau) = \psi_{o,\theta}(\xi, \pi/4, \tau) = \psi_{o,\xi}(\infty, \theta, \tau) = 0 \quad (\text{A.3.5.1b})$$

$$\begin{aligned} \Delta\psi_1 + \tau \exp \left[\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta \right] \psi_1 = & \pi \left[\tau \frac{\partial\psi_o}{\partial\tau} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial\psi_o}{\partial\xi} \right] - \\ & \tau \exp \left[\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta \right] \left\{ \frac{\pi}{24} \xi^4 \sin 2\theta - \alpha \left(\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.3.5.2a})$$

$$\psi_1(\xi, 0, \tau) = \psi_{1,\theta}(\xi, \pi/4, \tau) = \psi_{1,\xi}(\infty, \theta, \tau) = 0 \quad (\text{A.3.5.2b})$$

Para resolver el problema correspondiente a ψ_1 es necesario conocer la función

$\partial\psi_o/\partial\tau$. Esta es solución del siguiente problema lineal:

$$\Delta\psi_{o,\tau} + \tau\psi_{o,\tau}\exp\left[\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2\text{sen}2\theta\right] = -\exp\left[\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2\text{sen}2\theta\right] \quad (\text{A.3.5.3a})$$

$$\psi_{o,\tau}(\xi, 0, \tau) = (\psi_{o,\tau})_\theta(\xi, \pi/4, \tau) = (\psi_{1,\tau})_\xi(\infty, \theta, \tau) = 0 \quad (\text{A.3.5.3b})$$

Puede comprobarse que el problema $\Delta\phi + \tau\exp[\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2\text{sen}2\theta]\phi$, con las condiciones de contorno $\phi(\xi, 0) = \phi_\theta(\xi, \frac{\pi}{4}) = \phi_\xi(\infty, \theta) = 0$, es autoadjunto y por tanto la condición para que (A.3.5.3) admita solución es que el miembro de la derecha sea ortogonal a las funciones del núcleo del operador anterior, es decir, a las soluciones del problema homogéneo asociado a (A.3.5.3).

A partir de la solución de (A.3.5.1) sabemos que en $\tau = \tau_o$ el problema (A.3.5.3) carece de solución pues $\partial\psi_o/\partial\tau = \infty$. Por tanto el problema

$$\mathbf{L}[\phi] \equiv \Delta\phi + \tau_o\exp\left[\varphi_o(\xi, \theta) - \frac{1}{2}\xi^2\text{sen}2\theta\right]\phi = 0 \quad (\text{A.3.5.4})$$

$$\phi(\xi, 0) = \phi_\theta(\xi, \pi/4) = \phi_\xi(\infty, \theta) = 0$$

donde $\varphi_o(\xi, \theta) = \psi_o(\xi, \theta, \tau_o)$, debe tener una autofunción no nula y tal que

$$\int_{\Omega} \phi(\xi, \theta)\exp\left[\varphi_o(\xi, \theta) - \frac{1}{2}\xi^2\text{sen}2\theta\right]\xi d\xi d\theta \neq 0 \quad (\text{A.3.5.5})$$

La función ϕ solución de (A.3.5.4) se determina con la condición adicional $\|\phi\| = 1$ aunque puede tomarse cualquier otra proporcional.

Cuando $\tau_o - \tau \ll 1$ la solución de (A.3.5.1) puede buscarse como:

$$\psi_o(\xi, \theta, \tau) = \varphi_o(\xi, \theta) + \nu_1(\hat{\tau})A_1(\xi, \theta) + \nu_2(\hat{\tau})A_2(\xi, \theta) + \dots$$

siendo $\hat{\tau} = \tau_o - \tau$. Llevando esta expresión a (A.3.5.1a) se obtiene:

$$\mathbf{L}[A_1] = \frac{\hat{\tau}}{\nu_1}e^{\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2\text{sen}2\theta} + o(1)$$

Al aplicar la condición de resolubilidad a este problema y teniendo en cuenta (A.3.5.4) se encuentra que debe verificarse $\hat{\tau}/\nu_1 \rightarrow 0$, en cuyo caso la solución puede ponerse como $A_1 = \phi(\xi, \theta)$.

La ecuación para A_2 puede ahora escribirse como:

$$\mathbf{L}[A_2] = \left\{ \frac{\hat{\tau}}{\nu_2} - \frac{1}{2} \frac{\nu_1^2}{\nu_2} \tau_o \phi^2 \right\} e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta}$$

cuya condición de resolubilidad es

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\hat{\tau}}{\nu_2} - \frac{1}{2} \frac{\nu_1^2}{\nu_2} \tau_o \phi^2 \right\} \phi e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta} \xi d\xi d\theta = 0$$

Para que ésta se verifique debe ser $\nu_2 = a_2 \hat{\tau}$ y $\nu_1 = \pm a_1 \sqrt{\hat{\tau}/\tau_o}$. La constante a_1 se determina mediante:

$$a_1 = \left\{ 2 \frac{\int_{\Omega} \phi e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta} \xi d\xi d\theta}{\int_{\Omega} \phi^3 e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta} \xi d\xi d\theta} \right\}^{1/2} \quad (\text{A.3.5.5})$$

Como ψ_o es creciente ν_1 debe ser negativa, con lo cual para $\tau_o - \tau \ll 1$ es

$$\psi_o(\xi, \theta, \tau) = \psi_o(\xi, \theta, \tau_o) - \frac{a_1}{\sqrt{\tau_o}} \sqrt{\tau_o - \tau} \phi(\xi, \theta) + \mathcal{O}(\tau_o - \tau) \quad (\text{A.3.5.6})$$

A partir de los resultados numéricos pueden calcularse las integrales anteriores obteniéndose $a_1 = 2.064$.

La solución de (A.3.5.2) se busca como

$$\psi_1(\xi, \theta, \tau) = \mu_1(\tau) B_1(\xi, \theta) + \mu_2(\tau) B_2(\xi, \theta) + \dots$$

Teniendo en cuenta (A.3.5.5) la ecuación para B_1 es:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}[B_1] = & \frac{1}{\mu_1 \sqrt{\hat{\tau}}} \frac{\pi}{2} \sqrt{\tau_o a_1} \phi - \frac{\pi}{\mu_1} \frac{\xi}{2} \frac{\partial \varphi_o}{\partial \xi} \\ & - \frac{\tau_o}{\mu_1} e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta} \left\{ \frac{\pi}{24} \xi^4 \text{sen} 2\theta - \alpha \left(\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta \right)^2 \right\} + o(1) \end{aligned}$$

cuya condición de resolubilidad sólo puede verificarse si $1/\mu_1 \sqrt{\hat{\tau}} \rightarrow 0$ lo que implica $1/\mu_1 \rightarrow 0$ y, por tanto, $B_1 = \phi$. Para B_2 se tiene la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}[B_2] = & \frac{1}{\mu_2 \sqrt{\hat{\tau}}} \frac{\pi}{2} a_1 \sqrt{\tau_o} \phi + \frac{\mu_1 \sqrt{\hat{\tau}}}{\mu_2} a_1 \sqrt{\tau_o} e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta} \phi^2 + \frac{\hat{\tau} \mu_1}{\mu_2} e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta} \phi - \\ & \frac{\tau_o}{\mu_2} e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta} \left\{ \frac{\pi}{24} \xi^4 \text{sen} 2\theta - \alpha \left(\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \text{sen} 2\theta \right)^2 \right\} + o(1) \end{aligned}$$

Para que ésta admita solución debe ser $1/\sqrt{\hat{\tau}}\mu_2 \sim 1$ y $\mu_1\sqrt{\hat{\tau}}/\mu_2 \sim 1$, con lo cual $\mu_1 \sim 1/\hat{\tau}$ y $\mu_2 \sim 1/\sqrt{\hat{\tau}}$. De la condición de resolubilidad se deduce

$$\mu_1 = -a_3/\hat{\tau}$$

siendo

$$a_3 = \frac{\pi}{2} \frac{\int_{\Omega} \phi^2 \xi d\xi d\theta}{\int_{\Omega} \phi^3 e^{\varphi_0 - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta} \xi d\xi d\theta} = 1.361 \quad (\text{A.3.5.7})$$

de manera que cuando $\tau_o - \tau \ll 1$ es

$$\psi_1(\xi, \theta, \tau) = -a_3 \frac{\phi(\xi, \theta)}{\tau_o - \tau} + \mathcal{O}(1) \quad (\text{A.3.5.8})$$

Por tanto puede escribirse:

$$\psi(\xi, \theta, \tau) = \psi_o(\xi, \theta, \tau_o) - \frac{a_1}{\sqrt{\tau_o}} \sqrt{\tau_o - \tau} \phi - \varepsilon a_3 \frac{1}{\tau_o - \tau} \phi + \dots \quad (\text{A.3.5.9})$$

Si $\tau_o - \tau = \mathcal{O}(\varepsilon^{2/3})$ ambas perturbaciones son del mismo orden lo que indica que la escala apropiada para describir los efectos no estacionarios es $\varepsilon^{2/3}$.

En consecuencia las variables que emplearemos para calcular la solución de (3.9) cuando $\tau_o - \tau \ll 1$ son:

$$\tau = \tau_o \left(1 + \varepsilon^{2/3} \sigma\right) \quad (\text{A.3.5.10})$$

$$\psi(\varepsilon, \theta, \tau) = \varphi_o(\xi, \theta) + \varepsilon^{1/3} \varphi_1(\xi, \theta, \sigma) + \varepsilon^{2/3} \varphi_2(\xi, \theta, \sigma) + \dots$$

Las ecuaciones para φ_1 y φ_2 que se obtienen al introducir las expresiones anteriores en (3.9) son:

$$\mathbf{L}[\varphi_1] = 0$$

$$\mathbf{L}[\varphi_2] = \pi \frac{\partial \varphi_1}{\partial \sigma} - \tau_o e^{\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta} \frac{1}{2} \varphi_1^2 - \tau_o \sigma e^{\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta}$$

La solución de la primera es

$$\varphi_1(\xi, \theta, \sigma) = f_1(\sigma) \phi(\xi, \theta)$$

siendo $f_1(\sigma)$ una función a determinar con la condición de que el problema para φ_2 sea resoluble, esto implica:

$$\int_{\Omega} \left\{ \pi \phi \frac{df_1}{d\sigma} - \tau_o e^{\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta} \left(\frac{1}{2} \phi^2 f_1^2 + \sigma \right) \right\} \phi \xi d\xi d\theta = 0$$

Por tanto la ecuación para determinar f_1 es

$$\frac{a_2}{\tau_o} \frac{df_1}{d\sigma} = \left(\frac{f_1}{a_1} \right)^2 + \sigma \quad (\text{A.3.5.11})$$

donde

$$a_2 = \pi \frac{\int_{\Omega} \phi^2 \xi d\theta d\xi}{\int_{\Omega} \phi e^{\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta} \xi d\theta d\xi} = 1.278$$

que debe integrarse con la condición $f_1 \sim -a_1 \sqrt{-\sigma}$ para $\sigma \rightarrow -\infty$ deducida del "matching" con la solución exterior mediante (A.3.5.9). Esta ecuación de Ricatti, que aparece en otros problemas semejantes a éste [KC, p.75] [KL], puede reducirse mediante la transformación:

$$f_1 = -a_1 \left(\frac{a_1 a_2}{\tau_o} \right)^{1/3} \frac{1}{V} \frac{dV}{ds}, \quad \sigma = s \left(\frac{a_1 a_2}{\tau_o} \right)^{2/3}$$

a la ecuación de Airy

$$\frac{d^2 V}{ds^2} + sV = 0$$

cuya solución general es [AB, p.446]:

$$V(s) = M[A_1(-s) + NB_i(-s)]$$

siendo A_i y B_i las funciones de Airy y M y N dos constantes a determinar. La condición que verifica f_1 cuando $\sigma \rightarrow -\infty$ es equivalente a

$$s \rightarrow \infty : \frac{1}{V} \frac{dV}{ds} \sim \sqrt{-s}$$

Teniendo en cuenta que

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{ds} = -\frac{A'_1(-s) + NB'_i(-s)}{A_1(-s) + NB_i(-s)}$$

y recurriendo a los desarrollos de $A_i(s)$ y $B_i(s)$ para $s \gg 1$ [AB, p.448]:

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{ds} = -\frac{-\frac{1}{2\sqrt{\pi}}(-s)^{1/4}e^{-\zeta}\{1 + \mathcal{O}(1/s)\} + \frac{N}{\sqrt{\pi}}(-s)^{1/4}e^{\zeta}\{1 + \mathcal{O}(1/s)\}}{\frac{1}{2\sqrt{\pi}}(-s)^{1/4}e^{-\zeta}\{1 + \mathcal{O}(1/s)\} + \frac{N}{\sqrt{\pi}}(-s)^{1/4}e^{\zeta}\{1 + \mathcal{O}(1/s)\}}$$

donde $\zeta = 2(-s)^{3/2}/3$. Si $N \neq 0$ el comportamiento sería $-\sqrt{-s}$, mientras que con $N = 0$ es $\sqrt{-s}$. En consecuencia $N = 0$ y $f_1 = a_1(a_1 a_2 / \tau_o)^{1/3} A'_i(-s)/A_i(-s)$, lo que determina la evolución de la temperatura en esta etapa de transición. La función $A_i(-s)$ no se anula si $-s > 0$ ($\sigma < 0$) pero si lo hace cuando $-s < 0$ ($\sigma > 0$). Por tanto la

temperatura $\varphi_1 = f_1(\sigma)\phi(\xi, \theta)$ diverge en $\sigma_o = (a_1 a_2 / \tau_o)^{2/3} s_o$ siendo s_o el primer cero de la función $A_i(-s)$, cuyo valor es $s_o = 2.3381 \dots$. El valor de σ en el cual se produce la ignición es, por tanto, $\sigma_o = 2.3381(a_1 a_2 / \tau_o)^{2/3}$ y el tiempo de ignición viene dado por

$$\tau_{ign} = \tau_o + 2.3381 \tau_o^{1/3} (\varepsilon a_1 a_2)^{2/3}$$

La temperatura en los instantes próximos a la ignición es:

$$\psi(\xi, \theta, \tau) = \varphi_o(\xi, \theta) + a_1 \left(\varepsilon \frac{a_1 a_2}{\tau_o} \right)^{1/3} \phi(\xi, \theta) \frac{A'_i(-s)}{A_i(-s)} + \dots$$

con

$$s = \left(\frac{\tau_o}{\varepsilon a_1 a_2} \right)^{2/3} \frac{\tau - \tau_o}{\tau_o}$$

Obsérvese que mientras la distribución de temperatura correspondiente a la etapa inicial presenta en τ_o una singularidad en la derivada temporal, la distribución en la etapa de transición tiene en s_o una singularidad tanto en la derivada como en el valor de la función.

Los resultados obtenidos en la etapa de transición dejan de ser válidos cuando $f_1 \sim \varepsilon^{-1/3}$. La evolución posterior puede probablemente describirse mediante métodos análogos a los empleados por Kassoy [KS1] [KS2] y Kapila [KA1] en el caso de explosiones térmicas y sobre todo, al de Kapila [KA2] que realiza la continuación natural de [LW1] analizando la formación de una onda de combustión en un sólido semiinfinito sometido a un flujo uniforme de calor. Esto supone analizar cuatro nuevas etapas:

- 1.- Una etapa de ignición caracterizada por $s - s_o \sim \mathcal{O}(\varepsilon^{1/3})$ y en la cual ψ aumenta desde valores de orden unidad a valores de orden $1/\varepsilon$ y, por tanto, el incremento de temperatura respecto de la inerte $\varphi - \varphi_i = \varepsilon\psi$ alcanza valores de orden unidad. Durante esta etapa tienen lugar la formación de un "hot-spot" en una región muy pequeña situada en torno al punto donde la temperatura alcanza el máximo. El incremento de temperatura ψ sufre variaciones de orden unidad y no puede desarrollarse según (A.3.5.10) aunque el modelo formado por las ecuaciones (3.9) es todavía aplicable.
- 2.- En la etapa subsiguiente, denominada de explosión, la temperatura φ difiere de la inerte en cantidades de orden unidad siendo necesario emplear ésta o $\tilde{\psi}$ en lugar de ψ . Este incremento de temperatura se produce en una

escala de tiempo que es exponencialmente corta en la cual tiene lugar el desarrollo del "hot-spot" que disminuye de tamaño pero crece en intensidad. A causa de esta pequeña duración la temperatura en el exterior del "hot-spot" permanece prácticamente congelada en el estado que alcanzó al final de la etapa de ignición.

- 3.- Cuando la temperatura en el interior del "hot-spot" sea próxima a la adiabática la fracción másica del reactante es muy pequeña lo que da lugar a que comience a moverse hacia la región interior donde existe combustible. Durante esta etapa que podemos denominar de arranque el "hot-spot" se transforma en una llama cuya velocidad de propagación es creciente.
- 4.- La última etapa corresponde a la propagación de la llama a una velocidad que en primera aproximación es constante. Evidentemente la descripción de estas dos últimas etapas requiere la incorporación al modelo de la ecuación para la fracción del reactante.

CAPITULO 4

GENERALIZACION DE LA TEORIA DE IGNICION EN SOLIDOS

4.1 INTRODUCCION

El método desarrollado en el capítulo anterior permite abordar el problema

$$\Delta\psi + \tau e^{\psi - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta} = 0$$

$$\psi(\xi, 0, \tau) = \psi_\theta(\xi, \pi/4, \tau) = \psi_\xi(\infty, \theta, \tau) = 0$$

desde la doble perspectiva de determinar el intervalo de valores de τ , $[0, \tau_{lim}]$, para el cual admite solución y, en su caso, calcularla. Este problema ha aparecido en relación con la teoría no estacionaria de ignición de sólidos semiinfinitos, cuando con una elección adecuada de las variables se obtiene una descripción que, en primera aproximación, es cuasiestacionaria.

Obviamente este método es aplicable a situaciones mucho más generales y puede emplearse para resolver problemas del tipo $\Delta\psi + \tau f(\psi, \bar{r}) = 0$, en dominios acotados o no, siendo f una función positiva suficientemente regular.

El objetivo del presente capítulo es efectuar, empleando el procedimiento anterior, la generalización del análisis de la ignición bidimensional a cuñas cuyo ángulo esté comprendido entre 0 y π y analizar la ignición de sólidos cuyo contorno presente una singularidad tridimensional. Este último problema es, desde el punto de vista numérico, notablemente más complicado y laborioso a causa de la dimensión adicional. En el caso particular de un sólido cónico esta dificultad desaparece ya que, debido a la simetría, el sólido puede describirse mediante un sistema de dos coordenadas, de manera que el procedimiento numérico resulta de una complejidad similar a la de los casos bidimensionales. Aunque de esta forma no se analiza el caso tridimensional de forma totalmente general puede considerarse suficientemente representativo sobre todo pensando en la comparación con la singularidad bidimensional.

4.2 IGNICION EN UNA CUÑA DE ANGULO θ_o ($0 < \theta_o < \pi$)

4.2.1 Formulación y adimensionalización

Las hipótesis bajo las que analizaremos la ignición en el sólido determinado por $\tilde{r} \geq 0$ y $0 < \tilde{\theta} < \theta_o$ son idénticas a las empleadas anteriormente. El modelo matemático es:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left[\frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left(\tilde{r} \frac{\partial T}{\partial \tilde{r}} \right) + \frac{1}{\tilde{r}^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \tilde{\theta}^2} \right] + \rho q B e^{-E/RT} \quad (4.1a)$$

$$T(\tilde{r}, \tilde{\theta}, 0) = T_o \quad (4.1b)$$

$$T(\tilde{r}, 0, t) = T(\tilde{r}, \theta_o, t) = T_s; \quad T_r(\infty, \tilde{\theta}, t) = 0 \quad (4.1c)$$

La adimensionalización se realiza de manera análoga al capítulo anterior. Es conveniente introducir un nuevo parámetro, que denominaremos σ , definido mediante:

$$\sigma = \theta_o / (\pi/2) \quad (0 < \sigma < 2) \quad (4.2)$$

y que permitirá expresar la condición de contorno en $\tilde{\theta} = \theta_o$ de la misma forma que en el capítulo anterior.

A partir de las variables características definidas en (3.2) las variables adimensionales que emplearemos son:

$$\tau = \tilde{t}/t_c, \quad r = \tilde{r}/r_c, \quad \theta = \tilde{\theta}/\sigma, \quad \varphi = (T - T_o)/(T_s - T_o) \quad (4.3)$$

que llevados a (4.1) dan lugar a:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \Delta \varphi + \frac{1}{\pi} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad (4.4a)$$

$$\varphi(r, \theta, 0) = 0 \quad (4.4b)$$

$$\varphi(r, 0, \tau) - 1 = \varphi_\theta(r, \pi/4, \tau) = \varphi_r(\infty, \theta, \tau) = 0 \quad (4.4c)$$

donde Δ representa el operador de Laplace modificado

$$\Delta \equiv \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sigma^2 r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

que a lo largo del apartado 4.2 será designado mediante Δ con independencia de la variable radial que se esté empleando en cada caso. En (4.4c) nuevamente se ha hecho uso de la simetría para reemplazar la condición $\varphi(r, \pi/2, \tau) = 1$ por $\varphi_\theta(r, \pi/4, \tau) = 0$.

El problema que determina la distribución inerte de temperatura admite solución de semejanza que puede calcularse por cualquiera de los procedimientos ya indicados. Utilizando el resultado de [CJ, p.464] ésta puede escribirse como:

$$\varphi_i = 1 - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{8}{\pi\sigma} \sin 2(2k+1)\theta \int_0^{\infty} e^{-s^2\tau} J_{\nu}(sr) \frac{ds}{s}$$

siendo $\nu = 2(2k+1)/\sigma$.

Para $r \ll 1$ y mediante el desarrollo de la función J_{ν} podemos construir un desarrollo en potencias de r para la función φ_i en la forma:

$$\varphi_i = 1 - \frac{2}{\pi} C(\sigma) \left(\frac{r}{2\sqrt{\tau}} \right)^{2/\sigma} \sin 2\theta + \mathcal{O} \left((r/2\sqrt{\tau})^{2+2/\sigma} \right)$$

siendo $C(\sigma) = \Gamma(1/\sigma)/\Gamma(2/\sigma)$. En la expresión anterior se observa que los gradientes de temperatura en ausencia de reacción son tanto más pequeños cuando menor sea el ángulo θ_0 y, por tanto, σ . La gráfica de la función $C(\sigma)$ (fig. 4.1) muestra que este efecto es todavía más acusado pues $C(\sigma)$ es una función creciente cuyo valor para $\sigma < .3$ es prácticamente nulo.

Usando como variable espacial $\tilde{\xi} = r/2\sqrt{\tau}$, variable de semejanza del problema inerte, y como variable dependiente $\tilde{\psi} = \varphi - \varphi_i$, la ecuación (4.4a) puede escribirse como:

$$4\tau \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tau} - 2\tilde{\xi} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{\xi}} = \Delta \tilde{\psi} + \frac{4\tau}{\pi} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\tilde{\psi} + \varphi_i - 1}{\alpha(\tilde{\psi} + \varphi_i - 1)} \right] \quad (4.5)$$

En la zona de reacción debe ser $\varphi - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$, de manera que tanto $\tilde{\psi}$ como $C(\sigma)\tilde{\xi}^{2/\sigma}$ deben ser de orden ε lo que conduce a las siguientes variables:

$$\psi = \tilde{\psi}/\varepsilon; \quad \xi = (4C(\sigma)/\pi\varepsilon)^{\sigma/2} \tilde{\xi}$$

Al introducir éstas en (4.5) y linealizar el exponente del término de Arrhenius se obtiene:

$$\pi\varepsilon f(\varepsilon, \sigma) \left(\tilde{\tau} \frac{\partial \psi}{\partial \tilde{\tau}} - \frac{1}{2}\xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) = \Delta \psi + \tilde{\tau} \exp \left(\psi - \frac{1}{2}\xi^{2/\sigma} \sin 2\theta \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^{\sigma}, \varepsilon) \quad (4.6a)$$

donde

$$f(\varepsilon, \sigma) = \frac{(\pi\varepsilon/4)^{\sigma-1}}{C(\sigma)^{\sigma}}. \quad (4.6b)$$

y

$$\tilde{\tau} = \tau f(\varepsilon, \sigma) \quad (4.6c)$$

Para los valores de σ y ε tales que el factor $f(\varepsilon, \sigma)$ sea de orden unidad la ecuación anterior cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ se reduce a:

$$\Delta\psi + \tilde{\tau} \exp \left[\psi - \frac{1}{2} \xi^{2/\sigma} \sin 2\theta \right] = 0$$

lo que significa que puede utilizarse el modelo cuasiestacionario para describir en primera aproximación la evolución de la temperatura en la zona de reacción.

La figura 4.2 representa la función $f(\varepsilon, \sigma)$ para distintos valores de ε . De ella se deduce que para $\sigma > 1$, es decir $\theta_0 > \pi/2$, esta simplificación está totalmente justificada pues $f(\varepsilon, \sigma) < 1$. Cuando $\sigma \ll 1$ puede demostrarse a partir del desarrollo en serie de la función Γ que $f(\varepsilon, \sigma) \simeq (16/\pi\varepsilon)/\varepsilon\sigma \gg 1$, de manera que para valores de σ moderadamente pequeños ya es $f(\varepsilon, \sigma) \gg 1$. La gráfica de la función $\varepsilon f(\varepsilon, \sigma)$ (figura 4.3) o la de la función $f(\varepsilon, \sigma)$ (figura 4.2) muestran que el intervalo de valores de σ en que puede aplicarse el modelo cuasiestacionario es muy reducido cuando $\sigma < 1$ (del orden de $0.7 - 1$). Físicamente esto puede explicarse si se tiene en cuenta que, como ya hemos señalado, al reducir el ángulo θ_0 la temperatura inerte es muy aproximadamente constante en una región cercana al vértice tanto más amplia cuanto menor sea σ . Es decir, el efecto de concentración del flujo de calor es tan importante que la onda térmica se ha propagado a distancias $\tilde{\xi}$ que pueden ser de orden unidad. Además la dimensión transversal característica es cada vez más pequeña de modo que el sólido es cada vez más supercrítico. Como consecuencia de estos factores el proceso que tiene lugar no es una elevación gradual de la temperatura en una región muy próxima al origen hasta alcanzar el "runaway" (ignición), sino que ésta tiene lugar en una región amplia de manera simultánea y que, debido a la condición supercrítica, se traduce en una explosión térmica, cuya descripción no puede hacerse manteniendo la hipótesis de que la zona de reacción es delgada, lo que obligaría a retener la derivada temporal.

Suponiendo que $\varepsilon f(\varepsilon, \sigma) = o(1)$ la temperatura en la zona de reacción está determinada por el siguiente problema:

$$\Delta\psi + \tilde{\tau} \exp \left[\psi - \frac{1}{2} \xi^{2/\sigma} \sin 2\theta \right] = 0 \quad (4.7a)$$

$$\psi(\xi, 0) = \psi_\theta(\xi, \pi/4) = \psi_\xi(\infty, \theta) = 0 \quad (4.7b)$$

que es totalmente análogo al problema (3.10).

4.2.2 Problema exterior ($\xi \gg 1$)

Procediendo como en el epígrafe 4.2.1 del capítulo anterior podemos identificar dos regiones bien diferenciadas cuando $\xi \gg 1$. Por una parte, una capa límite donde $\xi^{2/\sigma} \sin 2\theta = \mathcal{O}(1)$ y en la cual debe retenerse el término de reacción y, por otra, una región donde éste es exponencialmente pequeño.

Si definimos $\eta = \xi/\xi_\infty$ y efectuamos el mismo análisis anterior llegamos a la siguiente ecuación para el primer término del desarrollo de ψ en la capa límite:

$$\frac{1}{\eta^2} \frac{d^2 V_1}{dx^2} + \tilde{\tau} \exp(-\eta^{2/\sigma} x) = 0 \quad (4.8)$$

donde $V_1 = \psi \xi_\infty^{2\gamma}/\sigma^2$ y $x = \xi_\infty^{2/\sigma} \theta$, siendo $\gamma = 2/\sigma - 1$, que resuelta con $V_1(0, \eta) = 0$ y la condición de acoplamiento con la solución exterior proporciona:

$$\psi_{cl} = \frac{\sigma^2 \tilde{\tau}}{\xi_\infty^{2\gamma}} \frac{1}{\eta^{2\gamma}} \left(1 - e^{-\eta^{2/\sigma} x}\right) + o(\xi_\infty^{-2\gamma}) \quad (4.9)$$

Fuera de la capa límite la reacción está congelada y el problema a resolver es:

$$\Delta U_1 = 0 \quad (4.10a)$$

$$U_1(1, \theta) - g_1(\theta) = U_1(\eta, 0) - \frac{\sigma^2 \tilde{\tau}}{\eta^{2\gamma}} = U_{1,\eta}(\infty, \theta) = U_{1,\theta}(\eta, \pi/4) = 0 \quad (4.10b)$$

donde $U_1 = \psi_{ext} \xi_\infty^{2\gamma}$, $g_1(\theta)$ es la temperatura en $\eta = 1$ que se obtiene al resolver el problema en $\xi = \mathcal{O}(1)$ multiplicada por $\xi_\infty^{2\gamma}$ y $U_1(\eta, 0) = \sigma^2 \tilde{\tau}/\eta^{2\gamma}$ representa el efecto de la capa límite que consiste en modificar la temperatura aparente en $\theta = 0$.

Haciendo $F = U_1 - \sigma^2 \tilde{\tau}/\eta^{2\gamma}$ el problema (4.10a) se escribe como:

$$\eta^2 F_{\eta\eta} + \eta F_\eta + \frac{1}{\sigma^2} F_{\theta\theta} = -\frac{4\gamma^2 \sigma^2 \tilde{\tau}}{\eta^{2\gamma}} \quad (4.11a)$$

$$F(1, \theta) - g_1(\theta) + \sigma^2 \tilde{\tau} = F_\eta(\infty, \theta) = F(\eta, 0) = F_\theta(\eta, \pi/4) = 0 \quad (4.11b)$$

Este problema puede resolverse mediante separación de variables análogamente al apéndice 3.1. Si expresamos $F(\eta, \theta)$, $g_1(1, \theta)$ y $4\gamma^2 \sigma^2 \tilde{\tau}/\eta^{2\gamma}$ en la base formada por las

funciones $\omega_n(\theta) = \sqrt{8/\pi} \sin \lambda_n \theta$, con $\lambda_n = 2(2n - 1)$, podemos escribir:

$$F(\eta, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(\eta) \omega_n(\theta)$$

$$g_1(\theta) - \sigma^2 \tilde{\tau} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \omega_n(\theta)$$

$$4\gamma^2 \sigma^2 \tilde{\tau} = \Lambda \frac{1}{\lambda_n} \omega_n(\theta)$$

donde

$$a_n = \int_0^{\pi/4} (g_1(\theta) - \sigma^2 \tilde{\tau}) \sqrt{\frac{8}{\pi}} \sin \lambda_n \theta d\theta$$

$$\Lambda = \sqrt{\frac{8}{\pi}} 4\gamma^2 \sigma^2 \tilde{\tau}$$

Al introducir los desarrollos anteriores en (4.11) se obtiene la siguiente colección de problemas para determinar las funciones $f_n(\eta)$ ($n = 1, 2, \dots$):

$$\frac{d^2 f_n}{dx^2} - \frac{\lambda_n^2}{\sigma^2} f_n + \frac{\Lambda}{\lambda_n} e^{-2\gamma x} = 0 \quad (4.12a)$$

$$f_n(0) - a_n = f'_n(\infty) = 0 \quad (4.12b)$$

siendo $\eta = e^x$. Llamando $b_n = \Lambda / [\lambda_n(\lambda_n^2/\sigma^2 - 4\gamma^2)]$, la solución de (4.12) es:

$$f_n(\eta) = \begin{cases} (a_1 - b_1) \eta^{-\lambda_n/\sigma} + b_1 \eta^{-2\gamma} & n = 1 \quad \sigma \neq 1 \\ \left(a_1 + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \tilde{\tau} \ln \eta\right) \eta^{-\lambda_1} & n = 1 \quad \sigma = 1 \\ (a_n - b_n) \eta^{-\lambda_n/\sigma} + b_n \eta^{-2\gamma} & n \geq 2 \end{cases}$$

Obsérvese que la solución de (4.12) contiene el término resonante cuando $\lambda_n/\sigma = 2\gamma$, es decir, si $2n - 1 = 2 - \sigma$ con n entero y $\sigma \in]0, 2[$, lo que únicamente se verifica si $n = \sigma = 1$. Como el caso $\sigma = 1$ ha sido tratado en el capítulo anterior, las expresiones que escribiremos a continuación corresponderán a $\sigma \neq 1$.

Teniendo en cuenta que $1 = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \omega_n(\theta) / \lambda_n$ la expresión para ψ_{ext} es:

$$\psi_{ext}(\eta, \theta) = \frac{1}{\xi_{\infty}^{2\gamma}} \sqrt{\frac{8}{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (a_n - b_n) \eta^{-\lambda_n/\sigma} + \left(b_n + \sqrt{\frac{8}{\pi}} \frac{\sigma^2 \tilde{\tau}}{\lambda_n}\right) \eta^{-2\gamma} \right\} \sin \lambda_n \theta \quad (4.13)$$

de donde puede deducirse la expresión de $\partial\psi_{ext}(\xi_\infty, \theta)/\partial\xi$:

$$\frac{\partial\psi_{ext}(\xi_\infty, \theta)}{\partial\xi} = -\frac{1}{\xi_\infty^{2\gamma+1}} \sum_{n=1}^{\infty} (\lambda_n A_n + \sigma^2 \tilde{\tau} B_n) \frac{\text{sen} \lambda_n \theta}{\sigma} \quad (4.14)$$

siendo

$$A_n = \sqrt{8/\pi} a_n = (8/\pi) \int_0^{\pi/4} (g_1(\theta) - \sigma^2 \tilde{\tau}) \text{sen} \lambda_n \theta d\theta$$

y

$$B_n = \frac{8}{\pi} \frac{2\gamma\sigma}{\lambda_n + 2\gamma\sigma}$$

La función definida en (4.14) representa el flujo de calor que debe llegar desde la región $\xi = \mathcal{O}(1)$ a $\xi = \xi_\infty$ para que el problema de la conducción estacionaria de calor en la región exterior admita solución cuando $\psi(\xi_\infty, \theta) = g(\theta) = g_1(\theta)/\xi_\infty^{2\gamma}$ y sustituirá a la condición de contorno en el infinito al resolver el problema interior. Puede comprobarse que (4.14) es válido también cuando $\sigma = 1$.

4.2.3 Problema interior ($\xi = \mathcal{O}(1)$)

La función $\partial\psi_{ext}(\xi_\infty, \theta)/\partial\xi$ determinada en (4.14) permite transferir la condición de contorno en el infinito a $\xi = \xi_\infty$ y formular el siguiente problema para la región interior:

$$\Delta\psi + \tilde{\tau} \exp\left(\psi - \frac{1}{2}\xi^{2/\sigma} \text{sen} 2\theta\right) = 0 \quad (4.15a)$$

$$\psi(\xi, 0) = \psi_\theta(\xi, \pi/4) = \psi_\xi(\xi_\infty, \theta) - \frac{\partial\psi_{ext}(\xi_\infty, \theta)}{\partial\xi} = 0 \quad (4.15b)$$

El procedimiento numérico para resolver (4.15) es totalmente análogo al reseñado en el epígrafe 4.3 del capítulo anterior. El valor de ξ_∞ que debe emplearse para cada σ tiene que verificar las condiciones $\xi_\infty^{2\gamma} \gg 1$ y $\xi_\infty^{2/\sigma} \gg 1$. La primera de ellas permite que podamos retener un único término en el desarrollo en potencias de $1/\xi_\infty^{2\gamma}$ a través del cual se resuelve el problema en $\xi \gg 1$, y la segunda es necesaria para poder efectuar la aproximación $\text{sen} 2\theta \simeq 2\theta$ al resolver la capa límite. Cuando $\sigma < 1$ es $1/\xi_\infty^{2/\sigma} > 1/\xi_\infty^{2\gamma}$ y ξ_∞ se determina según:

$$\xi_\infty(\sigma) = [\xi_\infty(\sigma = 1)]^\sigma \quad (\sigma < 1)$$

y en el caso contrario:

$$\xi_{\infty}(\sigma) = [\xi_{\infty}(\sigma = 1)]^{\sigma/(2-\sigma)} \quad (\sigma > 1)$$

4.2.4 Resultados y conclusiones

La figura 4.4 muestra la relación entre el valor límite de $\tilde{\tau}$, $\tilde{\tau}_{lim}$, y el parámetro σ . A partir de ésta puede deducirse el valor del tiempo de ignición adimensional mediante:

$$\tau_{lim} = \tilde{\tau}_{lim} / f(\varepsilon, \sigma)$$

obteniéndose los resultados que aparecen en la figura 4.5. Las mismas consideraciones respecto del significado de τ_{lim} que se hicieron en el capítulo anterior deben tenerse ahora en cuenta. El análisis de la etapa de transición posterior puede realizarse de manera análoga al apéndice 3.5.

El tiempo de ignición dado por τ_{lim} es, como era de esperar, una función creciente de σ ya que cuanto mayor es éste menor es el efecto geométrico de concentración del calor que llega desde la superficie. Así cuando σ es próximo a 2 los gradientes de temperatura inerte son casi independientes de ξ y de orden unidad, de manera que desaparece la región situada en torno a $\xi = 0$ en la cual la temperatura inerte era aproximadamente igual a la superficial. La consecuencia es el aumento en el valor de τ_{lim} .

Los resultados de la figura 4.5 muestran una dependencia de τ_{lim} con ε diferente según sea $\sigma > 1$ ó < 1 . Esto es consecuencia de la adimensionalización realizada pues en el tiempo característico empleado interviene ε . Si tenemos en cuenta que el tiempo característico definido en (3.2) puede escribirse como:

$$t_c = \frac{1}{\varepsilon} \frac{c_p R T_s^2 e^{E/RT_s}}{\pi q B E}$$

el tiempo de ignición dimensional está determinado por

$$t_{ig,2D} = \frac{\tilde{\tau}_{lim}(\sigma)}{\varepsilon f(\varepsilon, \sigma)} \frac{c_p R T_s^2 e^{E/RT_s}}{\pi q B E} = \frac{\tilde{\tau}_{lim}(\sigma)}{\varepsilon f(\varepsilon, \sigma)} \frac{t_q}{\pi}$$

El factor $\tilde{\tau}_{lim}(\sigma)/\varepsilon f(\varepsilon, \sigma)$ es el tiempo de ignición relativo al químico y es función no sólo de σ sino también de ε , ya que el tiempo característico de ignición

respecto del químico es una potencia de ε cuyo valor depende del ángulo. Como puede observarse en la figura (4.6) este factor presenta el comportamiento esperado, es decir, para σ fijo $t_{ig,2D}$ es una función decreciente de ε .

Por último podemos comparar el tiempo de ignición bidimensional con el unidimensional suponiendo que éste es igual a t_c dado por (2.2) con $D = 1$. El cociente de ambos es:

$$\frac{t_{ig,2D}}{t_{ig,1D}} = \frac{2\varepsilon\tilde{\tau}_{lim}(\sigma)}{f(\varepsilon, \sigma)}$$

cuya gráfica se encuentra en la figura 4.7. Cuando $\sigma \rightarrow 2$ el cociente $t_{ig,2D}/t_{ig,1D} \rightarrow 1$ y por tanto $\tilde{\tau}_{lim} \rightarrow 1/8$ lo que concuerda con los resultados numéricos (fig. 4.4).

La transición hacia el proceso de ignición unidimensional cuando $\sigma \rightarrow 2$ puede apreciarse en el desplazamiento hacia el interior del sólido que experimenta el punto en el cual tiene lugar el incremento máximo de temperatura (fig. 4.8), para $\sigma = 2$ está situado en $\xi = \infty$ lo que hace necesario introducir la zona de conducción inerte no estacionaria que figura en el caso unidimensional. Este desplazamiento está asociado al aumento del tiempo característico de ignición a consecuencia de la dependencia con σ que presenta la temperatura inerte. El orden de magnitud del mismo puede estimarse mediante un procedimiento muy similar al empleado en el capítulo 1 pero con la variación de temperatura inerte que corresponda. A partir de la expresión para φ_i es fácil comprobar que cerca del vértice se verifica $(T_s - T)/(T_s - T_o) \sim (\tilde{r}/\ell_t)^{2/\sigma}$, siendo ℓ_t el espesor de la capa de conducción. En el instante de ignición $T_s - T \sim RT_s^2/E$, temperatura de Frank-Kamenetskii, y $\tilde{r} \sim \ell_r$, espesor de la zona de reacción, lo que determina la relación entre los espesores de ambas capas $\ell_r \sim \ell_t \varepsilon^{\sigma/2}$, que finalmente conduce a $t_{ig} \sim t_q \varepsilon^{-\sigma}$. Al aumentar el tiempo de ignición la onda térmica se propaga a distancias mayores con lo cual tanto su espesor como el de la zona de reacción aumentan. Por tanto el punto donde ψ es máxima, que puede tomarse como representativo de la zona de reacción, está situado en valores de ξ crecientes con σ . Cuando σ es próximo a 2 la longitud r_c con que se ha adimensionalizado el problema, y que es el espesor de la capa de conducción correspondiente a t_c , es demasiado pequeña por lo cual los valores de ξ donde la reacción no está congelada dejan de ser de orden unidad. Teniendo en cuenta los cambios de variable independiente realizados puede encontrarse que la relación entre ξ y r es $r = \xi \sqrt{\tau \varepsilon^{\sigma/2}}$, de manera que si ε no es suficientemente pequeño los valores de r en esta región no congelada pueden ser de orden unidad, con lo cual la aproximación empleada para la solución inerte deja de ser válida, siendo necesario retener más términos de la misma

cuyo efecto es aumentar localmente la temperatura inerte obteniéndose un tiempo de ignición menor que el dado por τ_{lim} . Esto explicaría que la gráfica de $t_{ig,2D}/t_{ig,1D}$ correspondiente a $\varepsilon = 1/10$, y en menor medida la correspondiente a $\varepsilon = 1/25$, presente un comportamiento anómalo para $\sigma \gtrsim 1.7$ consistente en $t_{ig,2D}/t_{ig,1D} > 1$.

4.3 IGNICION EN UN CONO DE SEMIANGULO θ_o ($0 < \theta_o < \pi/2$)

4.3.1 Formulación y adimensionalización

La conducción de calor no estacionaria en un sólido reactivo definido por $r \geq 0$ y $0 < \theta < \theta_o$ (coordenadas esféricas) con las hipótesis usuales respecto de los parámetros físico-químicos y la hipótesis adicional de simetría de revolución, puede formularse mediante:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left[\frac{1}{\tilde{r}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left(\tilde{r}^2 \frac{\partial T}{\partial \tilde{r}} \right) + \frac{1}{\tilde{r}^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) \right] + \rho Q B e^{-E/RT} \quad (4.16a)$$

$$T(\tilde{r}, \theta, 0) = T_o \quad (4.16b)$$

$$T(\tilde{r}, \theta_o, t) - T_s = T_{\tilde{r}}(\infty, \theta, t) - T_o = T_{\theta}(\tilde{r}, 0, t) = 0 \quad (4.16c)$$

La condición $T_{\theta}(\tilde{r}, 0, t) = 0$ puede considerarse como una condición de regularidad para la función T , consecuencia de la hipótesis de simetría.

Introduciendo los parámetros adimensionales $\alpha = (T_s - T_o)/T_s$ y $\varepsilon = RT_s/E\alpha$, tomando como valores característicos de t y \tilde{r} :

$$t_c = \frac{\alpha c_p T_s}{\pi Q B e^{-E/RT_s}} \quad (4.17)$$

$$r_c^2 = \frac{\alpha \lambda T_s}{\pi \rho Q B e^{-E/RT_s}}$$

y definiendo como nuevas variables:

$$\begin{aligned} \tau &= t/t_c, \\ r &= \tilde{r}/r_c, \\ y &= \cos \theta, \\ \varphi &= (T - T_o)/(T_s - T_o) \end{aligned} \quad (4.18)$$

el problema (4.16) adopta la forma:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \Delta \varphi + \frac{1}{\pi} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad (4.19a)$$

$$\varphi(r, y, 0) = 0 \quad (4.19b)$$

$$\varphi(r, y_o, \tau) - 1 = \varphi_r(\infty, y, \tau) = 0 \quad (4.19c)$$

en el dominio definido por $r > 0$ e $y_o = \cos \theta_o < y < 1$, y donde Δ representa el operador de Laplace

$$\Delta \equiv \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((1 - y^2) \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\}$$

que como antes será designado en lo sucesivo mediante Δ sin hacer referencia a la variable radial. Obsérvese que en las condiciones (4.19c) no aparece la correspondiente a $T_\theta(\tilde{r}, 0, t) = 0$ pues en la variable y ésta se verifica imponiendo simplemente que $\varphi_y(r, 1, \tau)$ esté acotada.

En el apéndice 4.2 se detalla el procedimiento para calcular la solución inerte correspondiente al problema (4.19) así como su expresión aproximada para $r/2\sqrt{\tau} \ll 1$. Esta es:

$$\varphi_i \simeq 1 - \frac{2}{\pi} k(\nu) P_\nu(y) \left(\frac{r}{2\sqrt{\tau}} \right)^\nu \quad (4.20)$$

donde ν es el mínimo de las raíces positivas de $P_\mu(y_o) = 0$, siendo $P_\mu(y)$ la función de Legendre de orden μ , y $k(\nu)$ una constante definida por

$$k(\nu) = -\frac{\pi}{2} \frac{\Gamma(\frac{\nu+1}{2})}{\nu \Gamma(\nu + \frac{1}{2})} \left(\frac{dP_\nu(y_o)}{d\nu} \right)^{-1} \quad (4.21)$$

Las figuras 4.9 y 4.10 muestran las gráficas de $\nu(y_o)$ y $k(\nu)$.

Tomando como nuevas variables $\tilde{\xi} = r/2\sqrt{\tau}$, variable de semejanza del problema inerte, y $\tilde{\psi} = \varphi - \varphi_i$ el problema (4.19) puede escribirse como:

$$4\tau \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tau} - 2\tilde{\xi} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{\xi}} = \Delta \tilde{\psi} + \frac{4\tau}{\pi} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\psi - \frac{2}{\pi} k(\nu) P_\nu(y) \tilde{\xi}^\nu}{1 + \alpha(\tilde{\psi} + \varphi_i - 1)} \right] \quad (4.22a)$$

$$\tilde{\psi}(\tilde{\xi}, y, 0) = 0 \quad (4.22b)$$

$$\tilde{\psi}(\tilde{\xi}, y_o, \tau) - 1 = \tilde{\psi}_{\tilde{\xi}}(\infty, y, \tau) = 0 \quad (4.22c)$$

De nuevo deducimos que en la zona de reacción las variable apropiadas son $\psi = \tilde{\psi}/\varepsilon$ y $\xi = (4k(\nu)/\pi\varepsilon)^{2/\nu} \tilde{\xi}$, que llevadas a (4.22) dan lugar, una vez linealizado el término de

Arrhenius, a la siguiente ecuación:

$$\pi \varepsilon f(\varepsilon, \nu) \left[\tau \frac{\partial \psi}{\partial \tau} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right] = \Delta \psi + \tau f(\varepsilon, \nu) \exp \left[\psi - \frac{1}{2} P_\nu(y) \xi^\nu \right] \left\{ 1 - \alpha \varepsilon \left(\psi - \frac{1}{2} P_\nu(y) \xi^\nu \right)^2 + o(\varepsilon) \right\} \quad (4.23)$$

siendo $f(\varepsilon, \nu) = (\pi \varepsilon / 4)^{-1+2/\nu} (k(\nu))^{2/\nu}$, cuya gráfica (figura 4.11) indica que para valores del semiángulo menores que $\pi/4$ este factor crece rápidamente dejando de ser de orden unidad y, en consecuencia, sería necesario retener la derivada temporal. Las razones físicas para que esto ocurra son análogas a las expuestas anteriormente.

Suponiendo que ε y ν son tales que $\varepsilon f(\varepsilon, \nu) = o(1)$ (fig. 4.12) y con $\tilde{\tau} = \tau f(\varepsilon, \nu)$ el problema que determina la temperatura en la zona de reacción es:

$$\Delta \psi + \tilde{\tau} \exp \left(\psi - \frac{1}{2} P_\nu(y) \xi^\nu \right) = 0 \quad (4.24a)$$

$$\psi(\xi, y_o) = \psi_\xi(\infty, y) = 0 \quad (4.24b)$$

4.3.2 Problema exterior ($\xi \gg 1$)

Cuando $\xi \gg 1$ la reacción química está congelada excepto en una capa límite próxima a $y = y_o$ y cuyo espesor es tal que $P_\nu(y) \xi^\nu = \mathcal{O}(1)$. Si usamos como variables:

$$x = \frac{1}{2} \xi_\infty^\nu \frac{P_\nu(y_o)}{dy} (y - y_o)$$

$$\eta = \xi / \xi_\infty$$

$$F = \left(\frac{1}{2} P_\nu(y_o) dy \right)^2 (1 - y_o^2) \xi_\infty^{2(\nu-1)} \psi$$

la ecuación en la capa límite es en primera aproximación:

$$\frac{d^2 F}{dx^2} + \eta^2 \tilde{\tau} e^{-\eta^\nu x} = 0$$

que resuelta con las condiciones $F(0) = 0$ y $F'(\infty) < \infty$ permite escribir:

$$\psi_{cl} = \frac{\tilde{\tau}}{\xi_\infty^{2(\nu-1)}} \frac{4}{(1 - y_o^2) m^2} \frac{1}{\eta^{2(\nu-1)}} (1 - \exp(-\eta^\nu x)) \quad (4.25)$$

siendo $m = dP_\nu(y_o)/dy$.

En el exterior de la capa límite, donde $y - y_o = \mathcal{O}(1)$, hacemos $\eta = \xi/\xi_\infty$ y $G = \psi \xi_\infty^{2(\nu-1)}$ obteniendo a partir de (4.24)

$$\Delta G = 0 \quad (4.26a)$$

$$G(\eta, y_o) - \frac{4\tilde{\tau}}{m^2(1 - y_o^2)\eta^{2(\nu-1)}} = G(1, y) - g(y) = G_\eta(\infty, y) = 0 \quad (4.26b)$$

donde $g(y)$ es la temperatura en $\eta = 1$ multiplicada por $\xi_\infty^{2(\nu-1)}$ y $4\tilde{\tau}/m^2(1 - y_o^2)\eta^{2(\nu-1)}$ es el valor de la temperatura aparente en $y = y_o$. Este problema se resuelve como en casos anteriores mediante $U(\eta, y) = G(\eta, y) - G(\eta, y_o)$ que transforma (4.26) en:

$$\Delta U = -\Lambda \frac{(2\nu - 2)(2\nu - 3)}{\eta^{2\nu}} \quad (4.27a)$$

$$U(1, y) - g(y) + G(1, y_o) = U_\eta(\infty, y) = U(\eta, y_o) = 0 \quad (4.27b)$$

donde $\Lambda = 4\tilde{\tau}/m^2(1 - y_o^2)$.

La función $U(\eta, y)$ puede expresarse mediante

$$U(\eta, y) = \sum_{k \in K} f_k(\eta) \omega_k(y)$$

donde $K = \{\nu, \dots\}$ es el conjunto de las raíces positivas de la ecuación $P_k(y_o) = 0$, y $\omega_k(y) = P_k(y)/\|P_k(y)\|$ de manera que $\{\omega_k\}_{k \in K}$ constituye una base del espacio V definido en el apéndice 4.2.

Teniendo en cuenta que $1 = \sum a_k \omega_k(y)$ con a_k definido en (A.4.2.6) y que $U(1, y) = \sum_{k \in K} b_k \omega_k(y)$ con

$$b_k = \int_{y_o}^1 (g(y) - G(1, y_o)) \omega_k(y) dy$$

el conjunto de ecuaciones para calcular $f_k(\eta)$ es:

$$\eta^2 \frac{d^2 f_k}{d\eta^2} + 2\eta \frac{df_k}{d\eta} - k(k+1)f_k = -(2\nu - 2)(2\nu - 3)\Lambda \frac{a_k}{\eta^{2(\nu-1)}} \quad (4.28a)$$

$$f_k(1) - b_k = f'_k(\infty) = 0 \quad (4.28b)$$

cuyas soluciones pueden escribirse como:

$$f_k(\eta) = A_k \eta^{-(k+1)} + B_k \eta^{-2(\nu-1)} \quad (4.29)$$

siendo

$$\begin{aligned}
 A_k &= b_k - \Lambda a_k \frac{c_\nu}{d_k - c_\nu} \\
 B_k &= \Lambda a_k \frac{c_\nu}{d_k - c_\nu} \\
 c_\nu &= (2\nu - 2)(2\nu - 3) \\
 d_k &= k(k + 1)
 \end{aligned} \tag{4.30}$$

y siempre que $d_k - c_\nu \neq 0$. Cuando ésto no ocurra será necesario incorporar soluciones logarítmicas. Es fácil comprobar que $d_k - c_\nu = 0$ si $\nu \geq 3$, con lo cual si se verifica $1 < \nu < 3$ la solución está dada por (4.29) y (4.30). Esta restricción no es demasiado importante pues $\nu > 3$ corresponde al rango $\theta_o < 40^\circ$ en el que este modelo deja de ser aplicable. Por otra parte puede comprobarse que, al igual que ocurría en el caso bidimensional, la expresión de la derivada de ψ no se modifica por la presencia del término logarítmico. De manera que la limitación anterior sólo debe tenerse en cuenta cuando haya que utilizar las funciones $f_k(\eta)$.

La función $G(\eta, y)$ admite, por tanto, la siguiente representación

$$G(\eta, y) = \sum_{k \in K} \omega_k(y) \left\{ b_k \eta^{-(k+1)} + \frac{d_k \eta^{-(2\nu-2)} - c_\nu \eta^{-(k+1)}}{d_k - c_\nu} \Lambda a_k \right\} \tag{4.31}$$

de donde

$$\frac{\partial \psi_{ext}(\xi_\infty, y)}{\partial \xi} = -\frac{1}{\xi_\infty^{2\nu-1}} \sum_{k \in K} \omega_k(y) (k+1) \left\{ b_k + \frac{(2\nu-2)}{2\nu+k-2} \Lambda a_k \right\} \tag{4.32}$$

Una vez calculado el flujo de calor en ξ_∞ que corresponde a la temperatura $\psi(\xi_\infty, y) = g(y)/\xi_\infty^{2\nu-2}$ se resuelve el problema interior utilizando (4.32) como condición de contorno.

4.3.3 Problema interior ($\xi = \mathcal{O}(1)$)

En la región $0 < \xi < \xi_\infty$, $y_o < y < 1$ el problema a resolver es:

$$\Delta \psi + \tilde{\tau} \exp \left(\psi - \frac{1}{2} P_\nu(y) \xi^\nu \right) = 0 \tag{4.33a}$$

$$\psi(\xi, y_o) = \psi_\xi(\xi_\infty, y) - \partial \psi_{ext}(\xi_\infty, y) / \partial \xi = 0 \tag{4.33b}$$

La discretización de (4.33) se realiza de modo análogo al expuesto en el apéndice 3.4 usando como variables $x = \ln(\xi + 1) / \ln(\xi_\infty + 1)$ y $z = (y - y_o) / (1 - y_o)$. Debido a la

ausencia de condiciones de contorno en $y = 1$ el esquema de diferencias que aproxima $\partial\psi(\xi, 1)/\partial y$ no puede ser centrado y es necesario emplear un esquema del tipo

$$\frac{\partial\psi(\xi, 1)}{\partial y} \simeq c_1\psi(\xi, 1) + c_2\psi(\xi, z_{n-1}) + c_3\psi(\xi, z_{n-2})$$

que es de orden k^2 cuando la malla es uniforme. Esta aproximación modifica ligeramente la estructura de la matriz B^* .

Para cada valor de y_o , y por tanto de ν , el valor de ξ_∞ debe elegirse de manera que se verifiquen simultáneamente:

$$\xi_\infty^{2(\nu-1)} \gg 1 \quad \text{y} \quad \xi_\infty^\nu \gg 1$$

4.3.4 Resultados y conclusiones

El problema 4.33 se ha resuelto para el rango de valores de θ_o definido por $22^\circ < \theta_o < 87^\circ$. Tanto los resultados obtenidos como las limitaciones del modelo son muy similares a los del caso plano analizados en el epígrafe 2.4 de este capítulo.

Para $\theta_o = \arccos(1/\sqrt{3}) \simeq 54,7^\circ$ se obtiene $\nu(y_o) = 2$ lo que representa la situación equivalente al ángulo recto del caso plano, en la cual $\tilde{\tau}_{lim} = \tau_{lim}$ pues $f(\varepsilon, \nu) = 1$. Las figuras (4.13) a (4.16) muestran diversos aspectos de la solución de (4.33) cuando $y_o = 1/\sqrt{3}$: relación $\tilde{\tau}_{lim} = \tilde{\tau}_{lim}(\|\psi\|_\infty)$ (fig. 4.13), gráficas de $\psi(\xi, \theta, \tilde{\tau})$ (fig. 4.14), perfiles del incremento de temperatura en el eje del cono (fig. 4.15) y en el radio máximo del dominio ξ_∞ (fig. 4.16). Las semejanzas entre esta solución y la correspondiente al ángulo recto son evidentes. Los valores de $\tilde{\tau}_{lim}$ en uno y otro caso son también muy parecidos: 2.798 en el cono frente a 2.547 en la esquina.

La figura (4.17) representa $\tilde{\tau}_{lim}$ como una función de θ_o . A partir de ésta pueden calcularse $\tau_{lim} = \tilde{\tau}_{lim}/f(\varepsilon, \nu)$ (fig. 4.18) y $\tilde{\tau}_{lim}/\varepsilon f(\varepsilon, \nu)$ (fig. 4.19) que muestra la dependencia del tiempo de ignición con ε . Cuando $\theta_o \rightarrow \pi/2$ la relación entre el tiempo de ignición para el cono, $t_{ig,3D^*}$, y el unidimensional $t_{ig,1D}$ debe tender a la unidad lo que determina que $\tilde{\tau}_{lim} \rightarrow 1/8$. De nuevo esto confirma la validez de los resultados numéricos de la figura (4.17).

Al igual que en el caso bidimensional el modelo falla cuando el ángulo es pequeño (del orden de $\pi/4$ si $\varepsilon = 1/10$ y del orden de $\pi/6$ cuando $\varepsilon = 1/100$), pues los

efectos no estacionarios son de orden unidad o mayores, y cuando θ_o es próximo a $\pi/2$ y $\varepsilon < 1/25$ como consecuencia de la mayor extensión de la zona reactiva que invalida la aproximación empleada para la temperatura inerte.

Si se comparan los tiempos de ignición $t_{ig,2D}$ y $t_{ig,3D^*}$ correspondientes a un mismo valor del ángulo α_o de la cuña y del cono ($\alpha_o = \sigma\pi/2$ para $t_{ig,2D}$ y $\alpha_o = 2\theta_o$ para $t_{ig,3D^*}$) se encuentra que debido al mayor efecto geométrico en el cono la relación $t_{ig,2D}/t_{ig,3D^*}$ es mayor que la unidad si bien ambos son del mismo orden (fig. 4.21). Para cada α_o $t_{ig,2D}/t_{ig,3D^*}$ es una función decreciente de ε pues se comporta como una potencia de $1/\varepsilon$ cuyo exponente es menor que la unidad, según se desprende de la adimensionalización realizada en el apéndice A.4.1, o bien de tener en cuenta que $t_{ig,2D}/t_{ig,3D^*} \propto \varepsilon^{2/\nu-\sigma}$ y, como puede comprobarse, $-.25 < 2/\nu - \sigma \leq 0$.

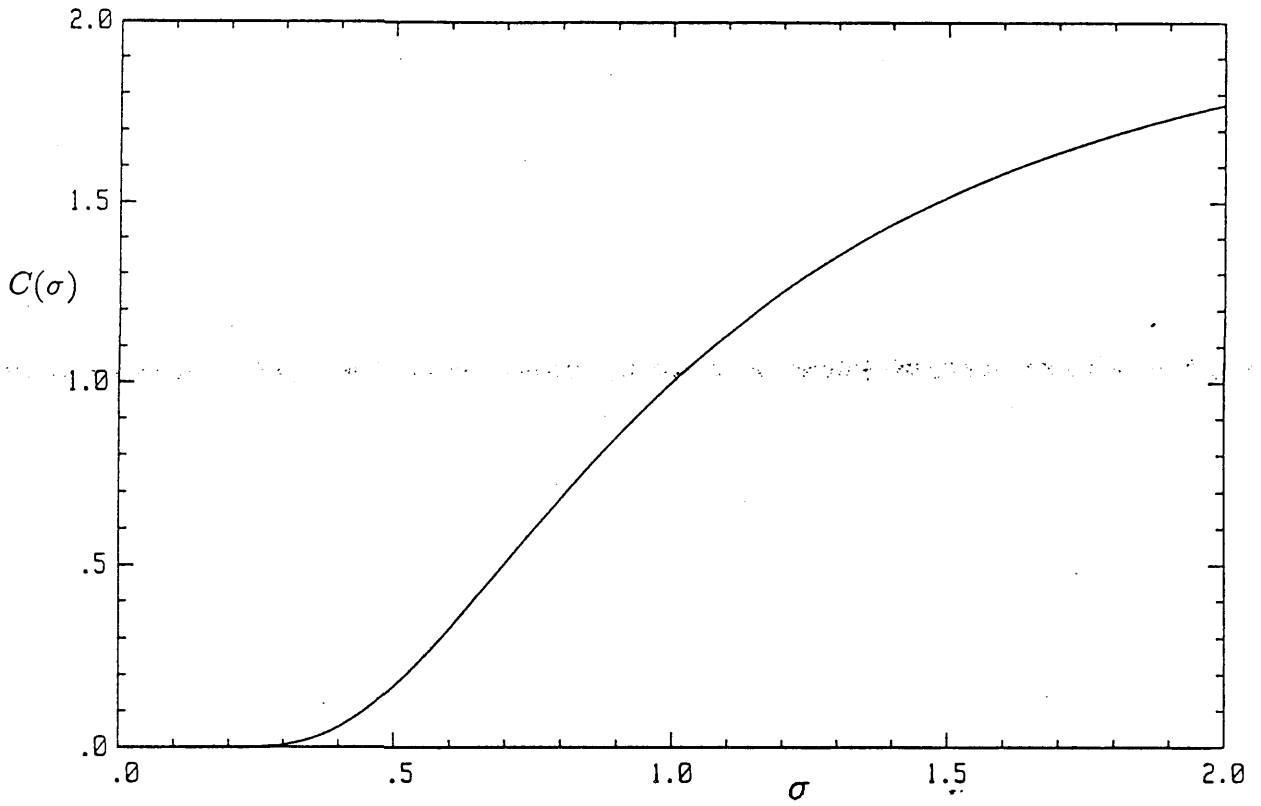


Figura 4.1 Gráfica de la función $C(\sigma)$.

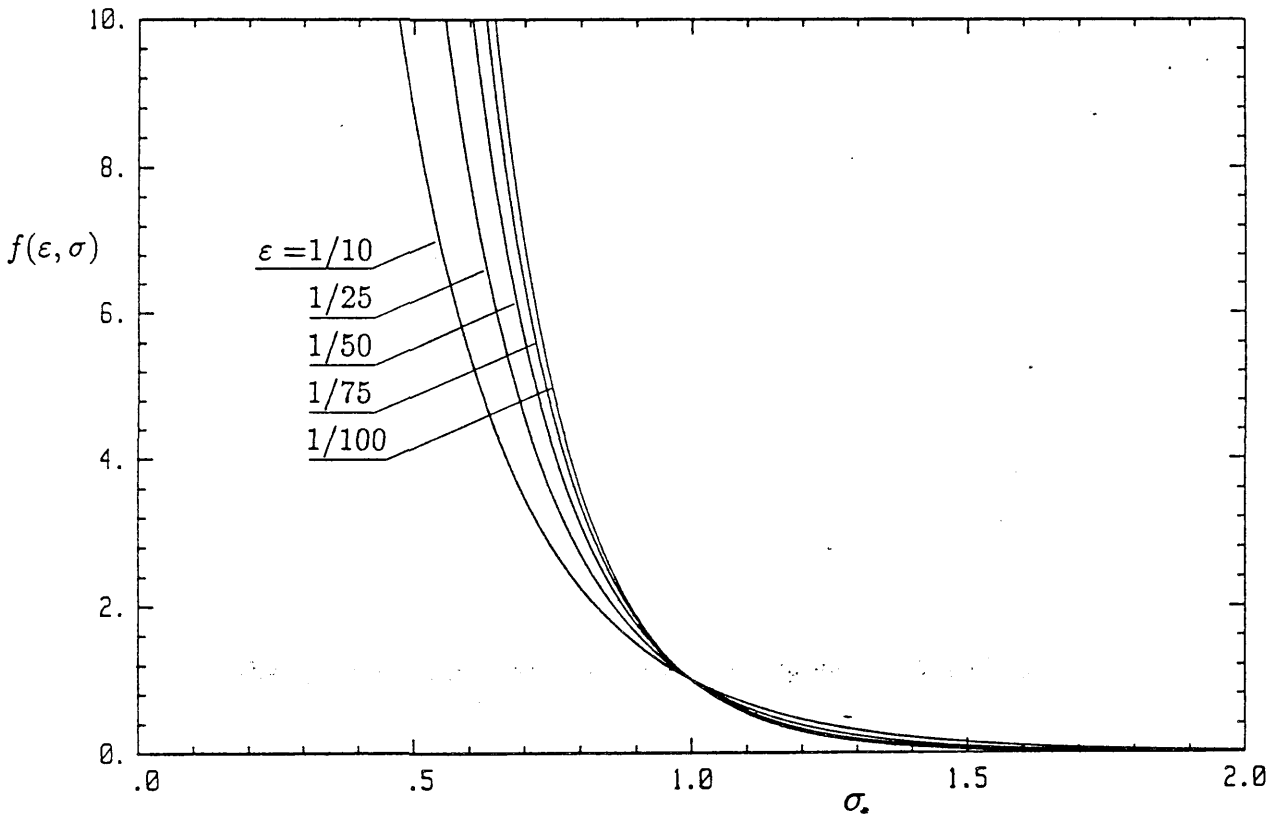


Figura 4.2 Gráfica de la función $f(\epsilon, \sigma)$.

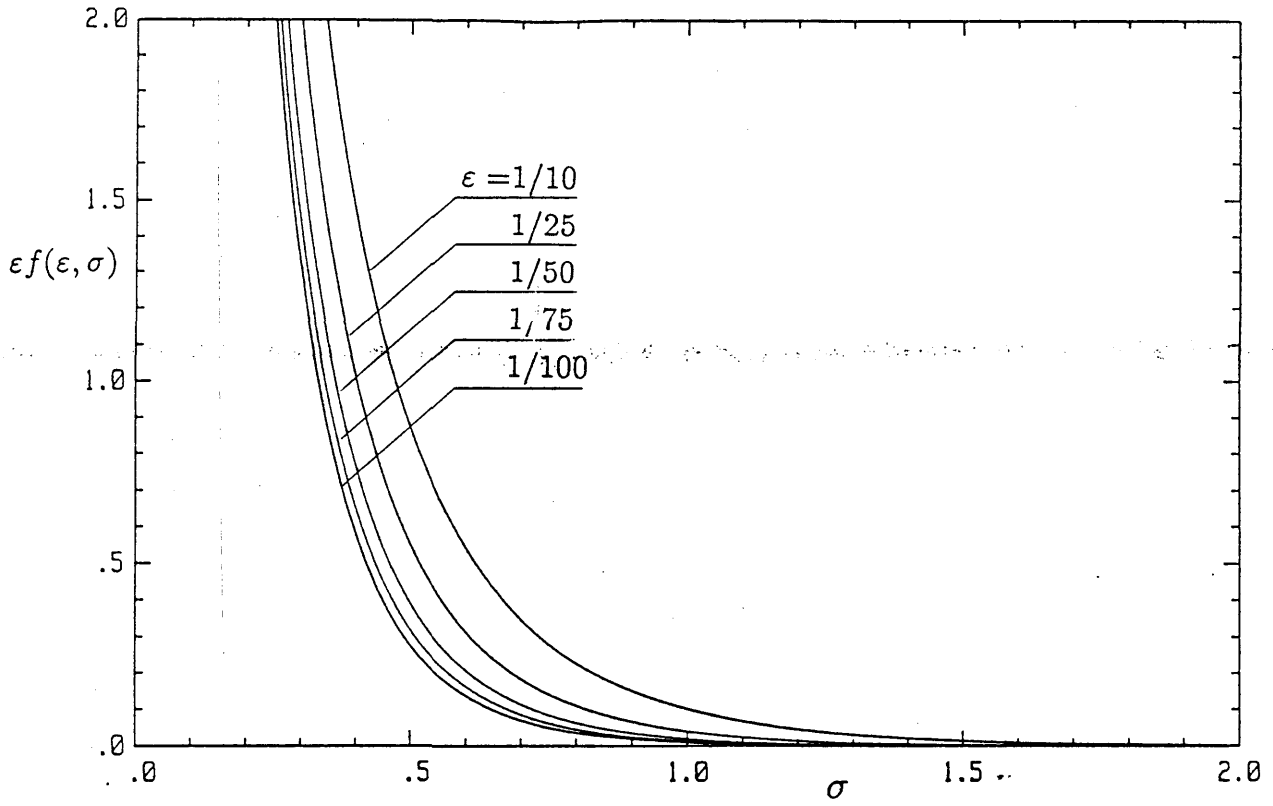


Figura 4.3 Gráfica de la función $\varepsilon f(\varepsilon, \sigma)$.

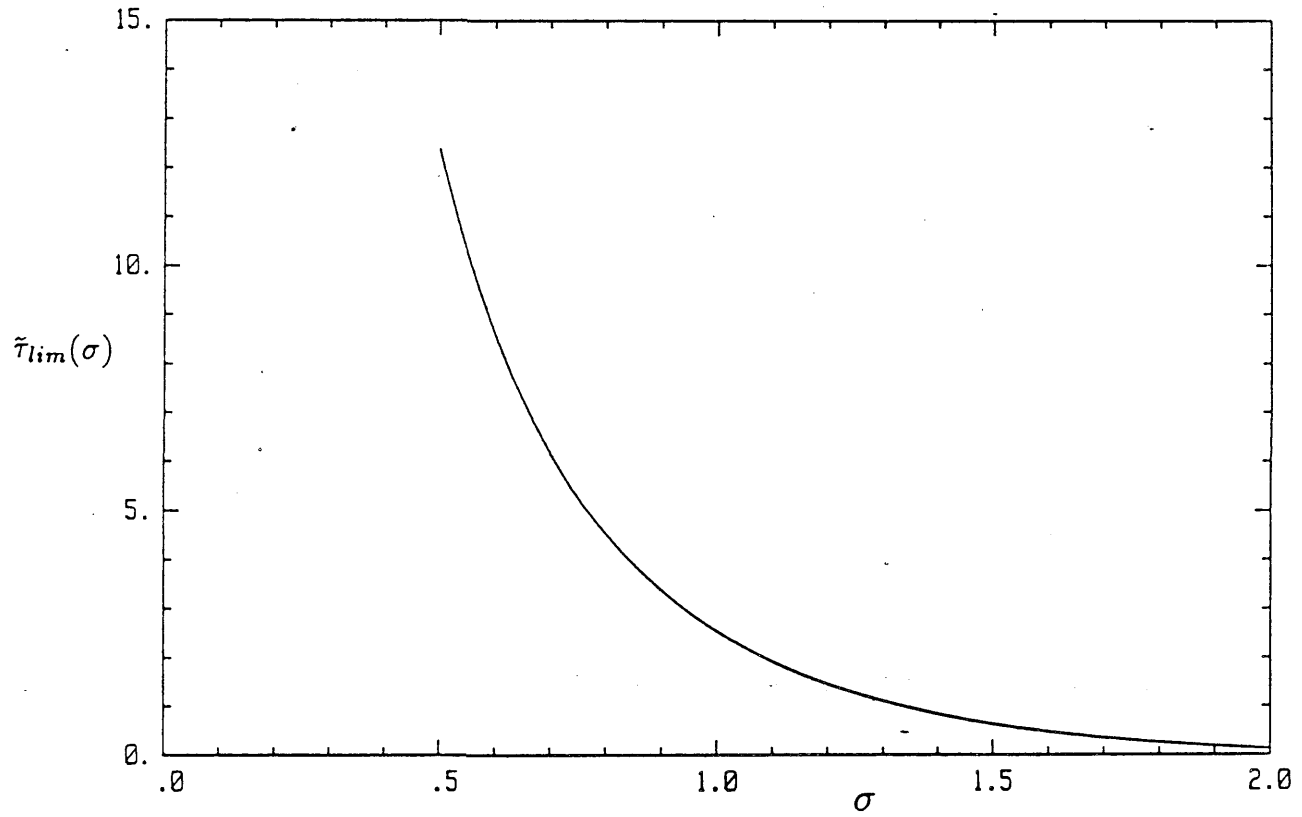


Figura 4.4 Valores máximos de $\tilde{\tau}$, $\tilde{\tau}_{lim}(\sigma)$, para los que el problema (3.7) admite solución.

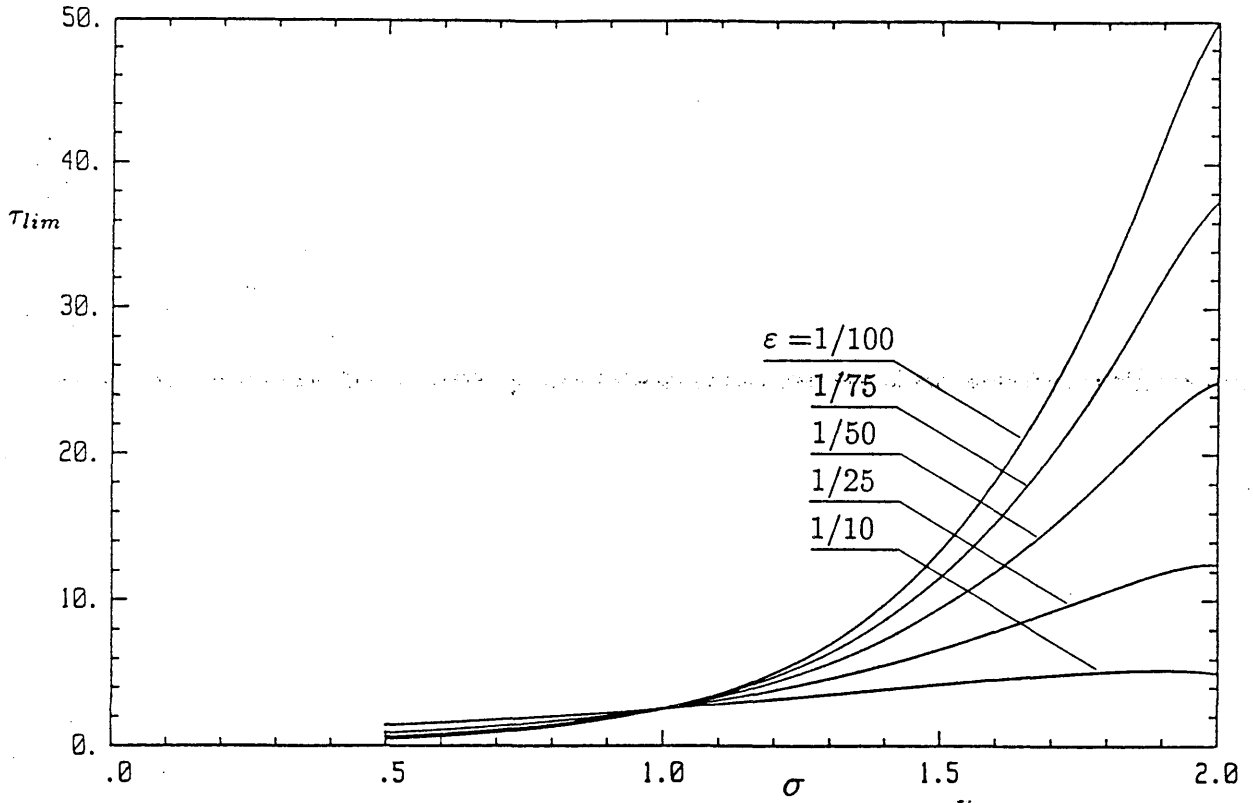


Figura 4.5 Tiempo adimensional de ignición, $\tau_{lim} = \tilde{\tau}_{lim}/f(\epsilon, \nu)$, correspondiente a la cuña.

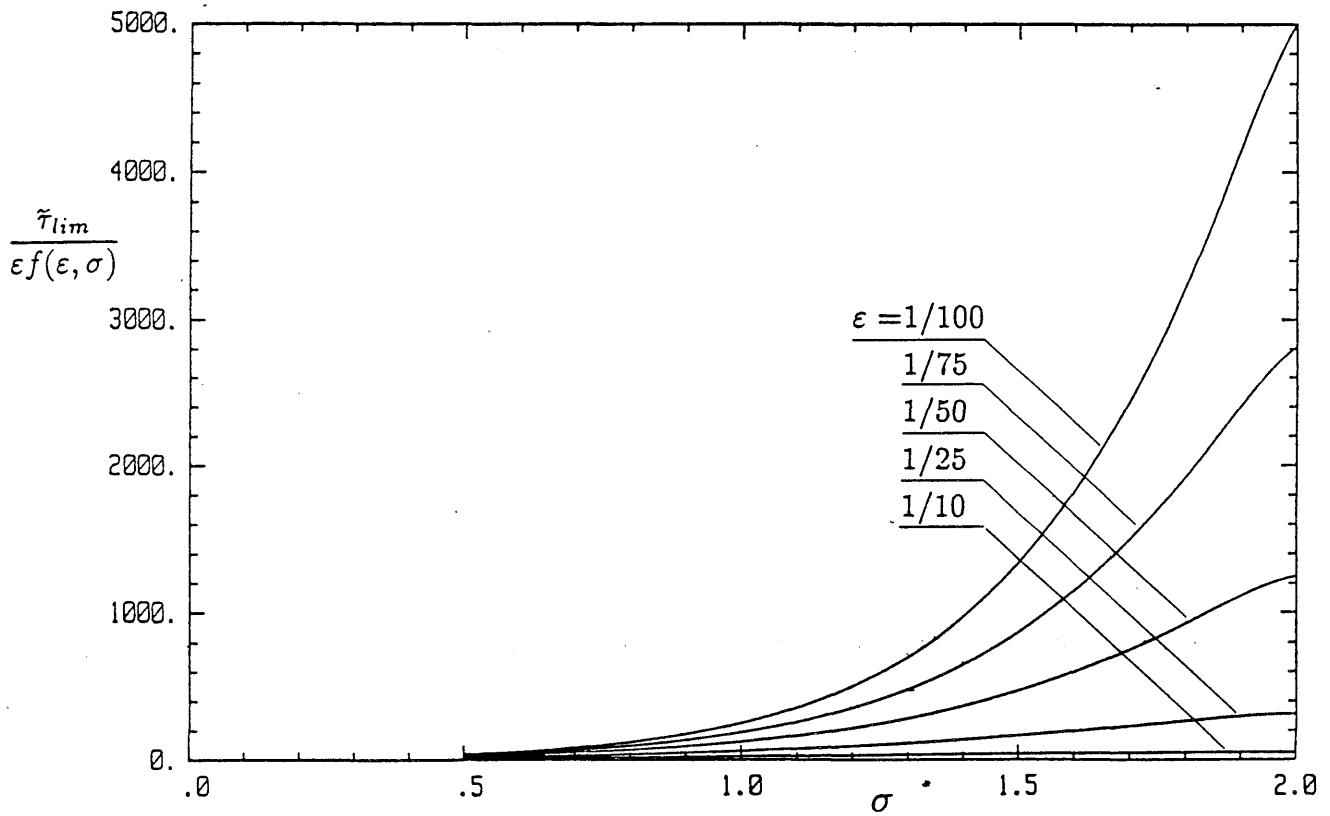


Figura 4.6 Relación entre el tiempo de ignición y el tiempo químico para la cuña.

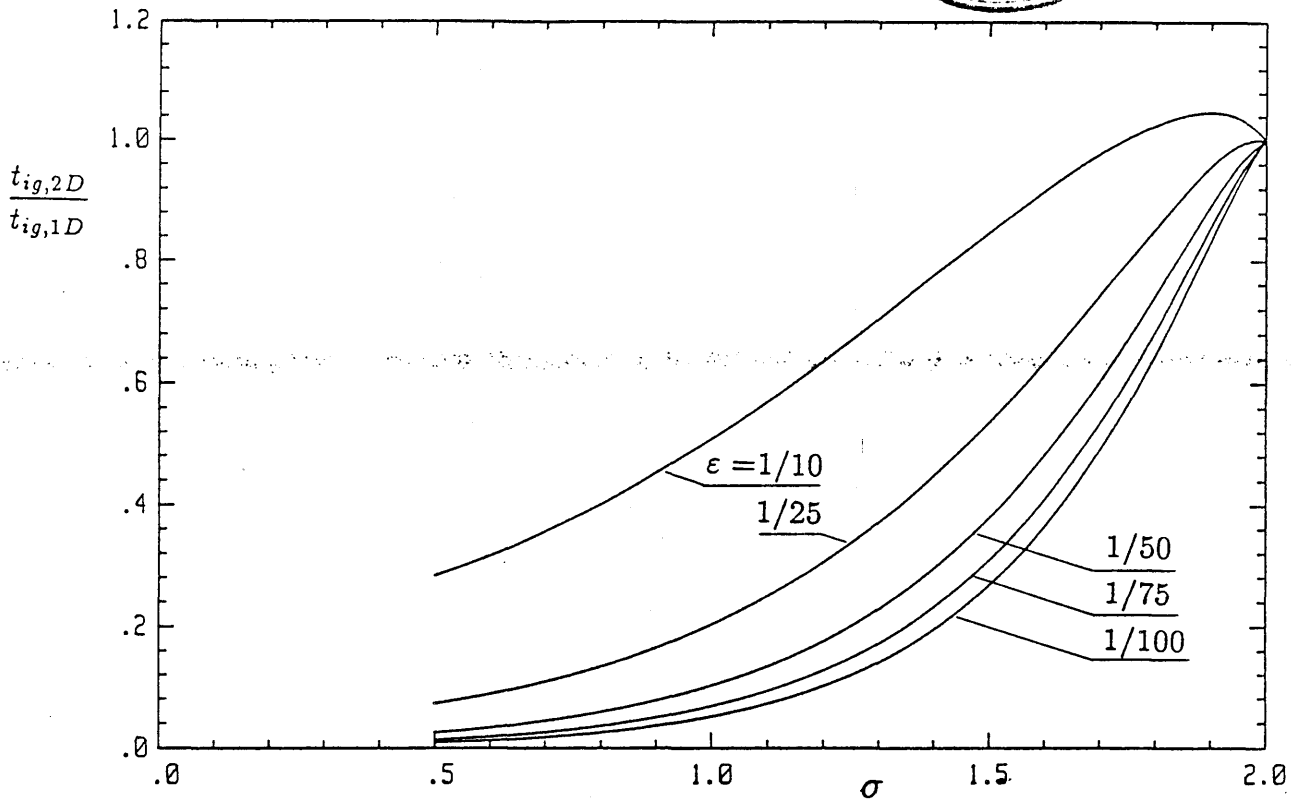


Figura 4.7 Relación entre el tiempo de ignición de la cuña y el del caso plano.

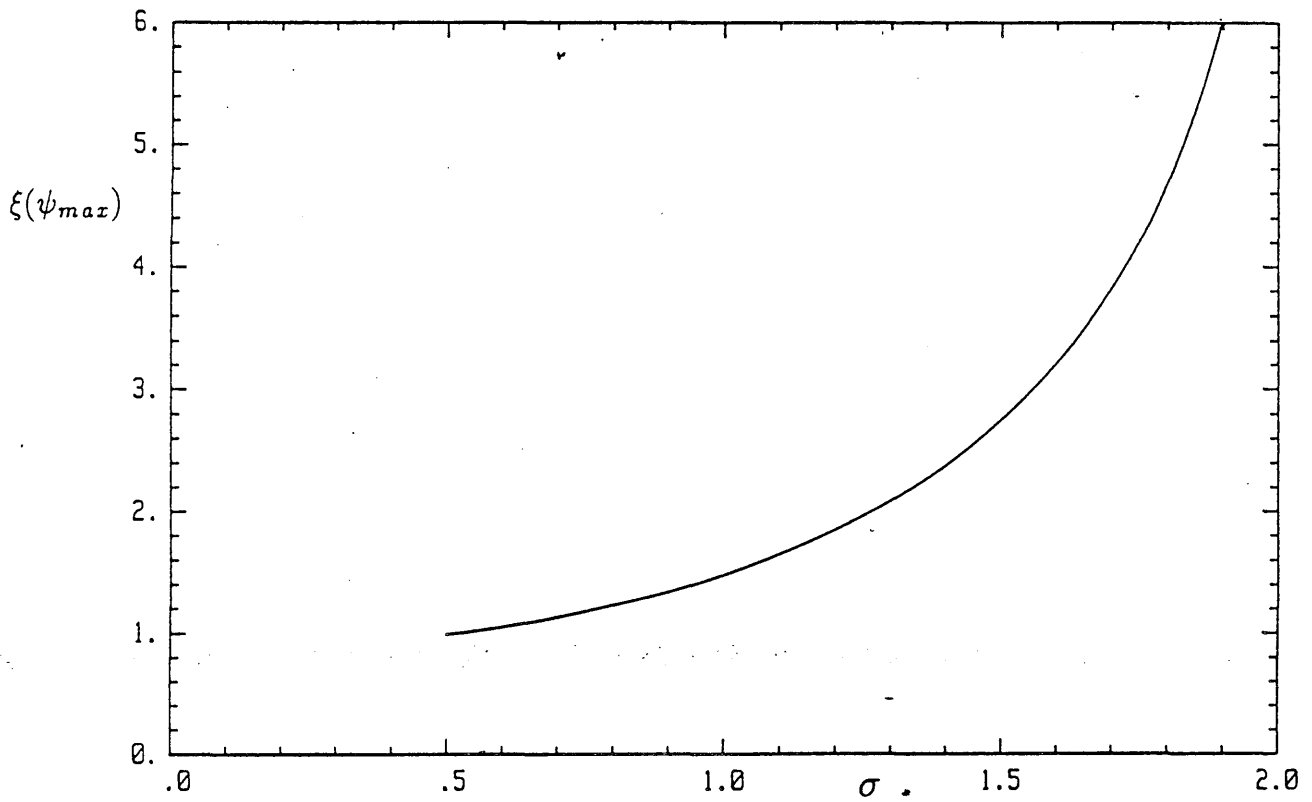


Figura 4.8 Valor de ξ en el cual se alcanza el máximo incremento de temperatura.

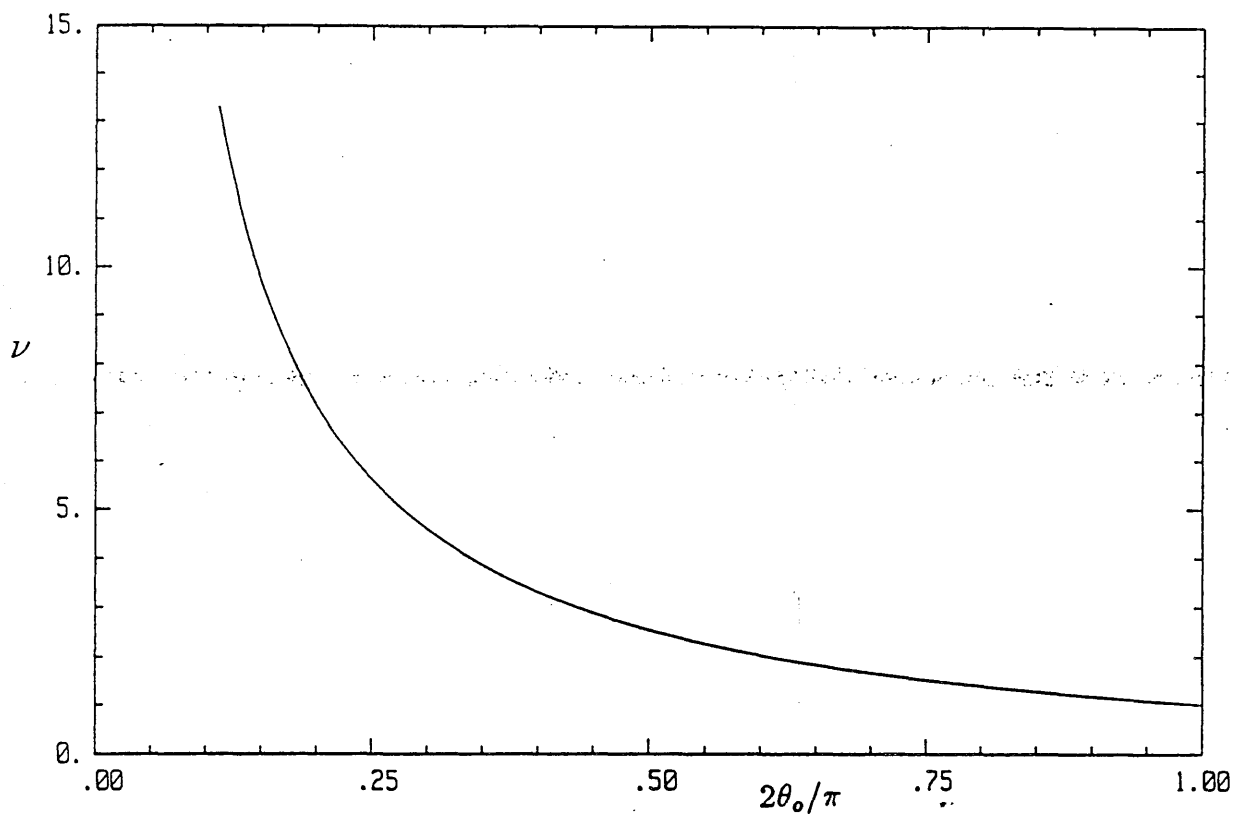


Figura 4.9 Orden de la primera función de Legendre que verifica $P_\nu(\cos\theta_0) = 0$.

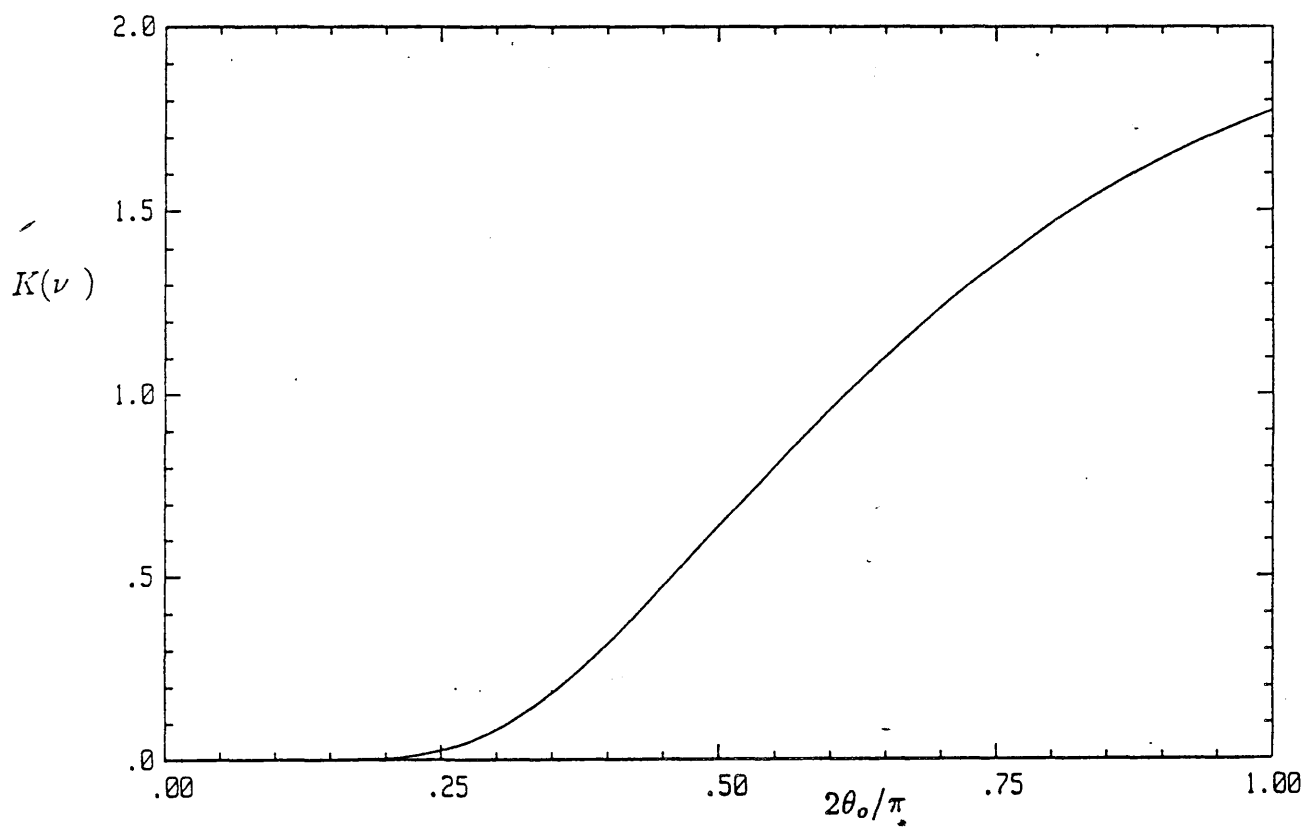


Figura 4.10 Gráfica de la función $k(\nu)$.

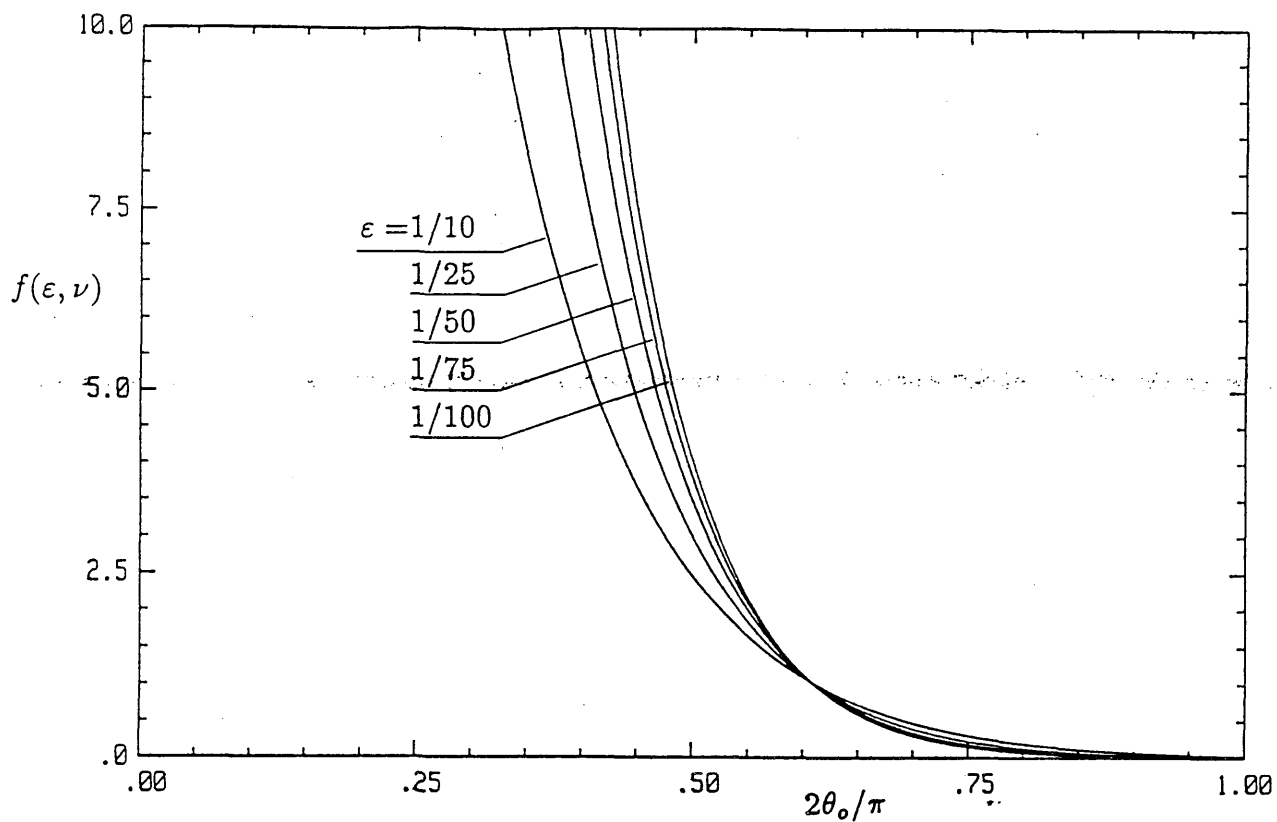


Figura 4.11 Gráfica de la función $f(\epsilon, \nu)$.

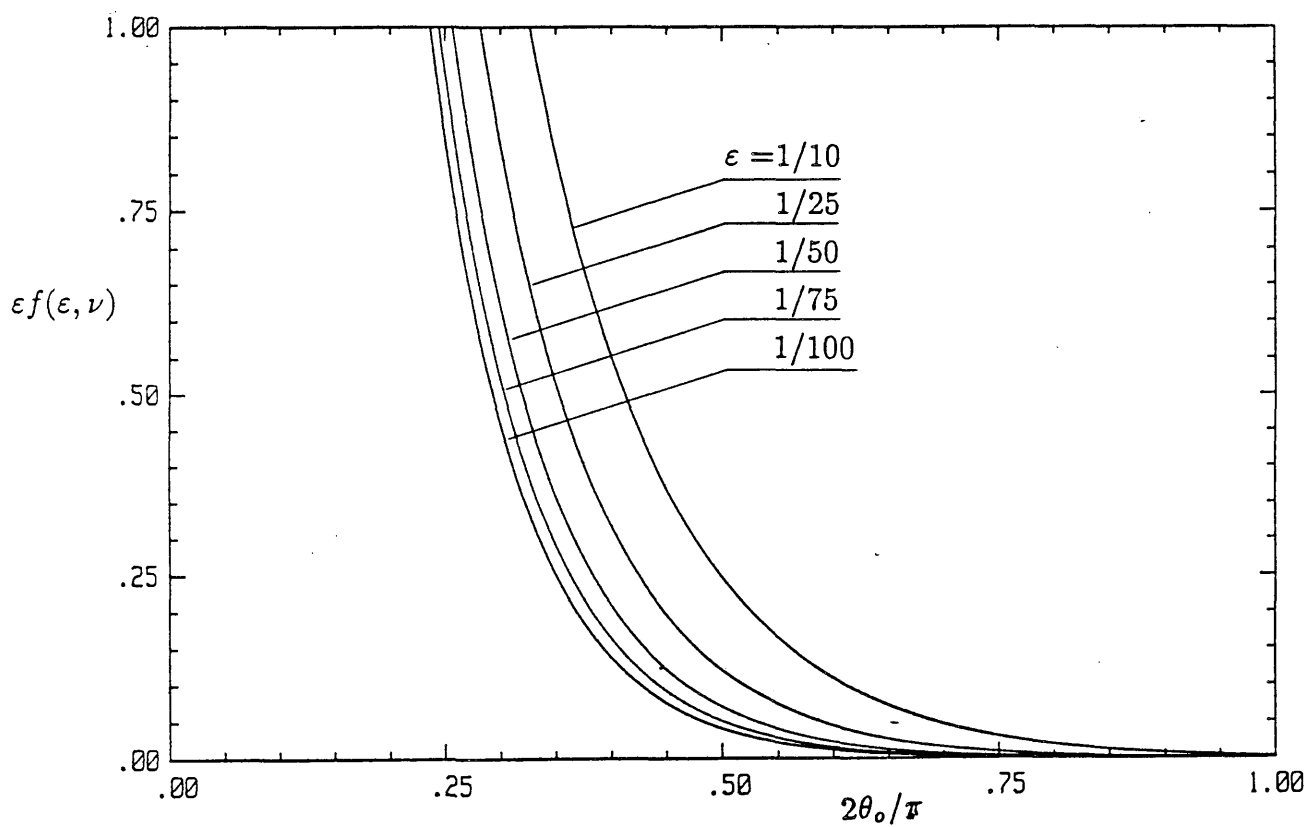


Figura 4.12 Gráfica de la función $\epsilon f(\epsilon, \nu)$.

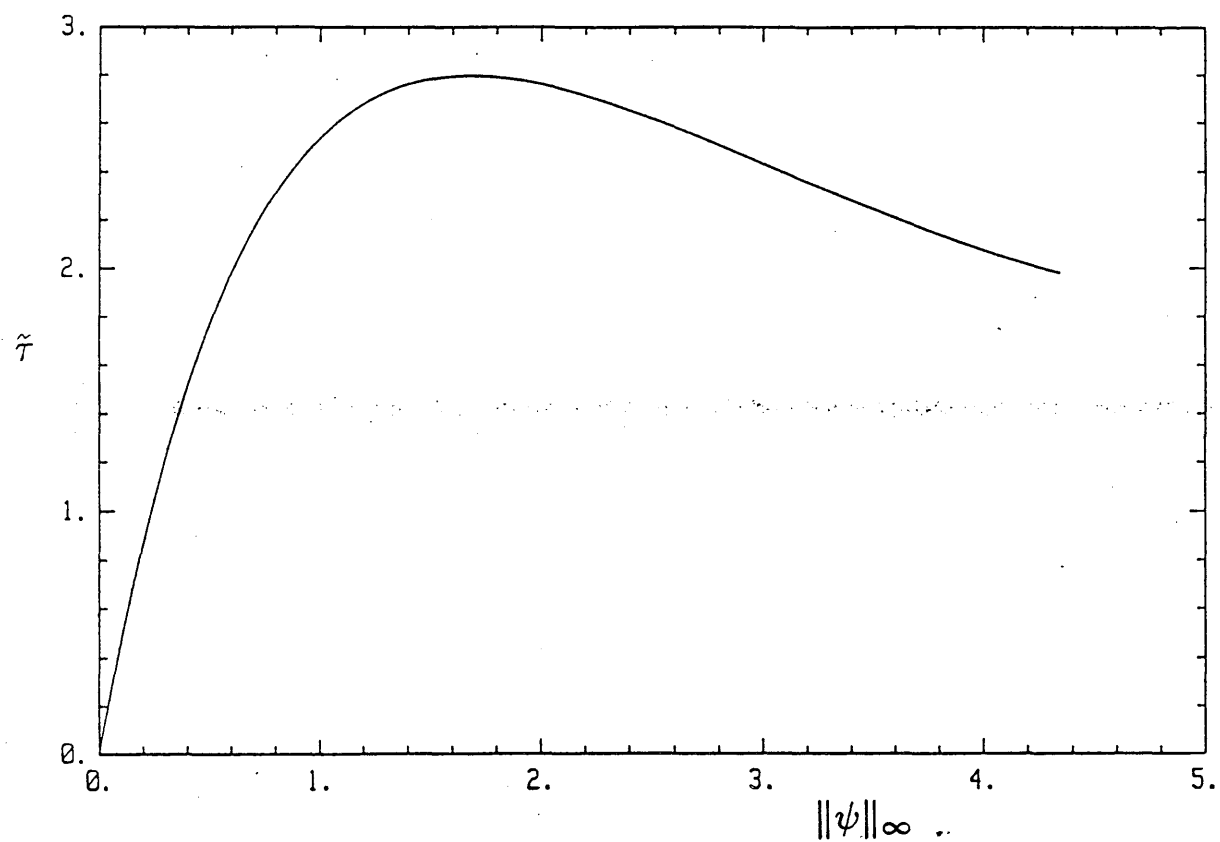


Figura 4.13 Gráfica de $\tilde{\tau} = \tilde{\tau}(\|\psi\|_\infty)$ correspondiente a $\theta_o = \arccos(1/\sqrt{3})$.

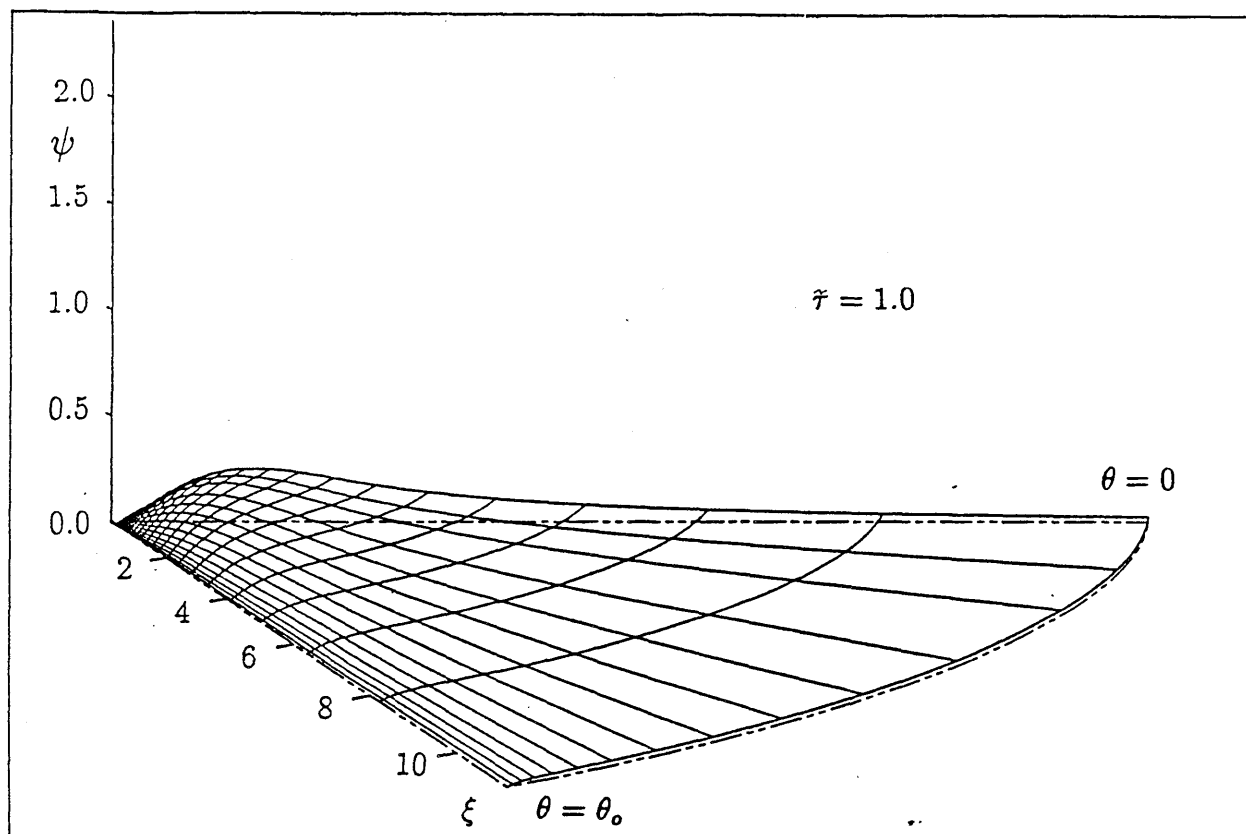


Figura 4.14.a Incremento de temperatura en $\tilde{\tau} = 1.0$ ($\theta_0 = \arccos(1/\sqrt{3})$).

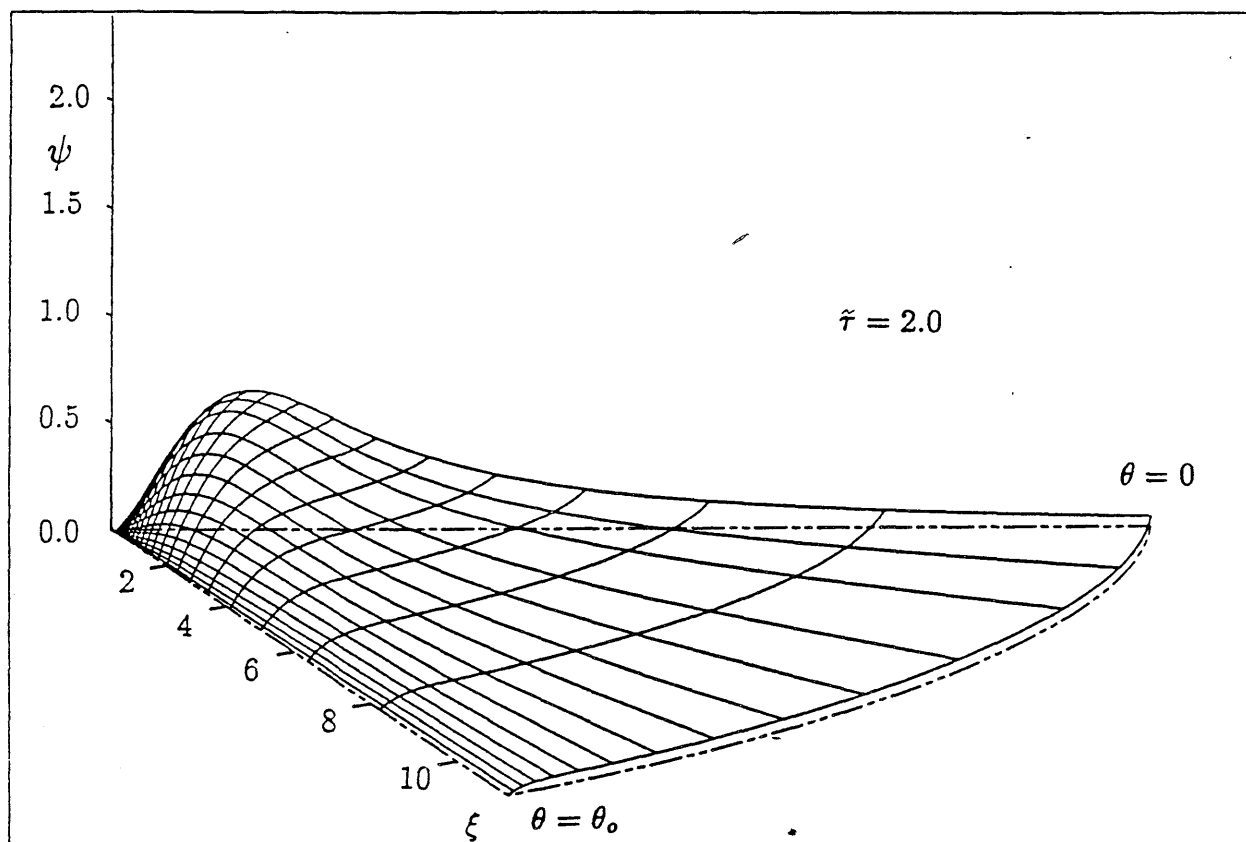


Figura 4.14.b Incremento de temperatura en $\tilde{\tau} = 2.0$ ($\theta_0 = \arccos(1/\sqrt{3})$).

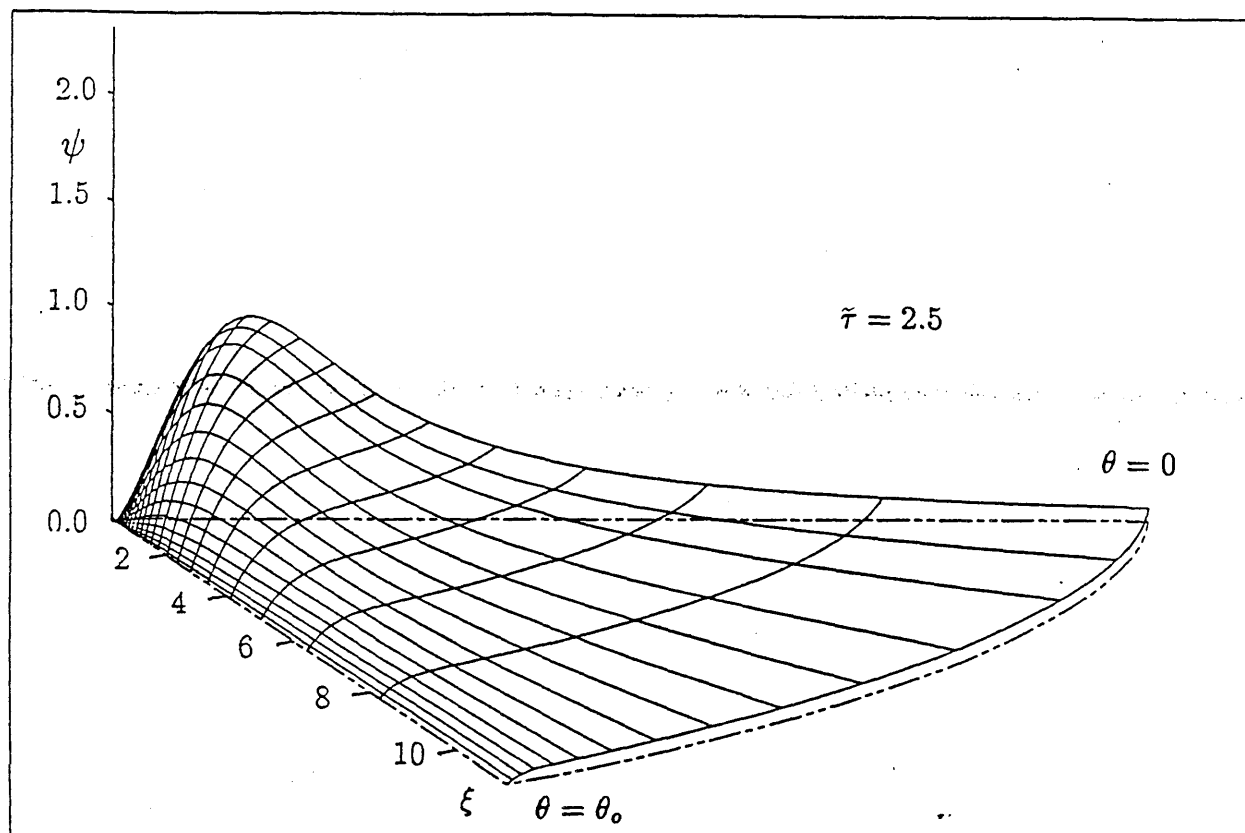


Figura 4.14.c Incremento de temperatura en $\bar{\tau} = 2.5$ ($\theta_o = \arccos(1/\sqrt{3})$).

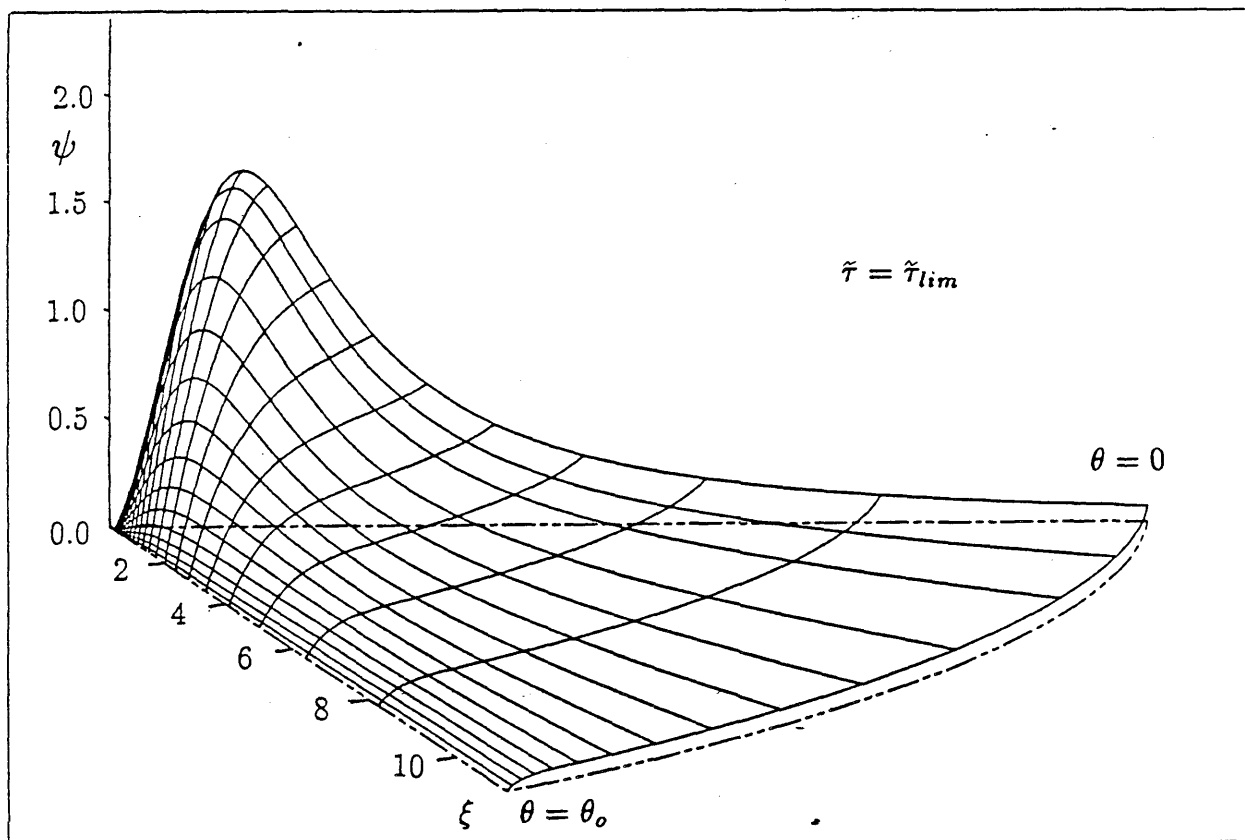


Figura 4.14.d Incremento de temperatura en $\bar{\tau} = \bar{\tau}_{lim}$ ($\theta_o = \arccos(1/\sqrt{3})$).

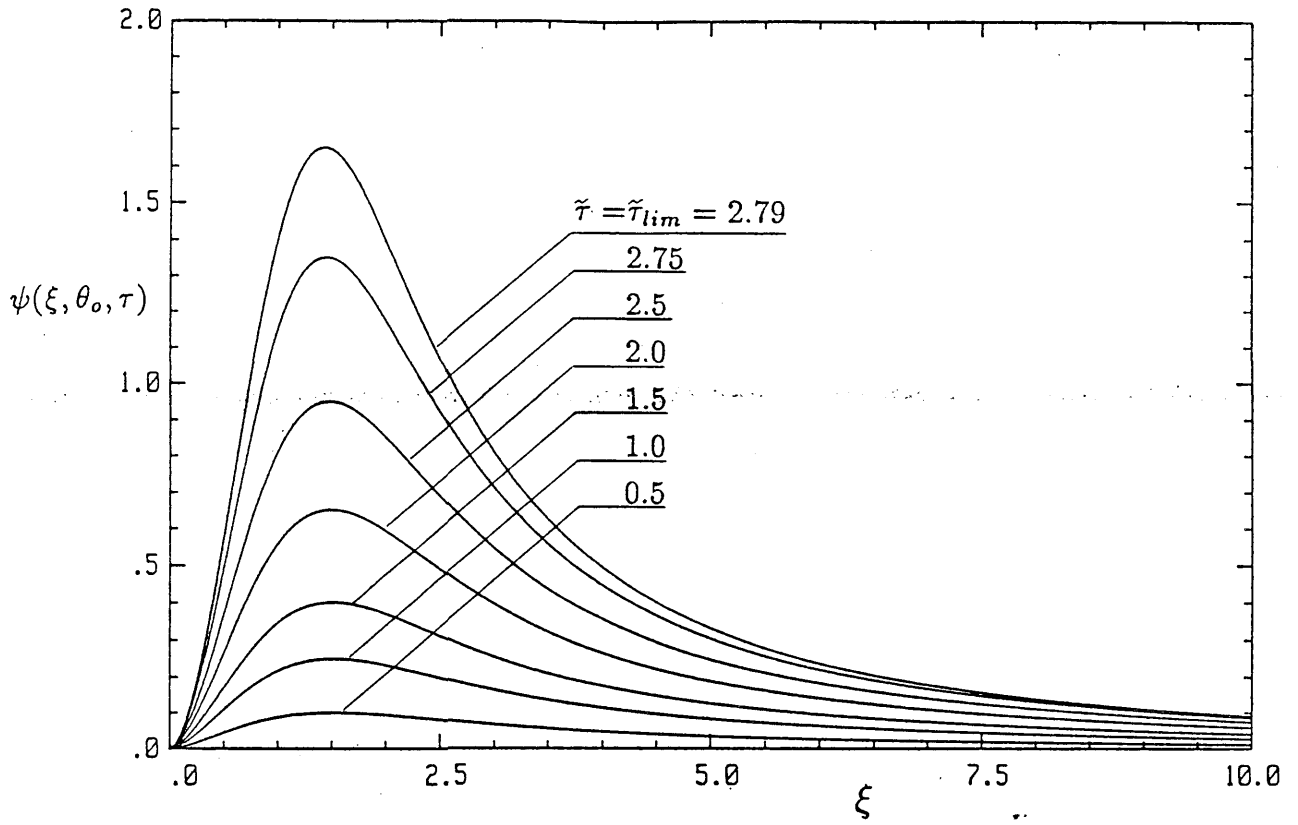


Figura 4.15 Incremento de temperatura en el eje para distintos valores de $\tilde{\tau}$ ($\theta_o = \arccos(1/\sqrt{3})$).

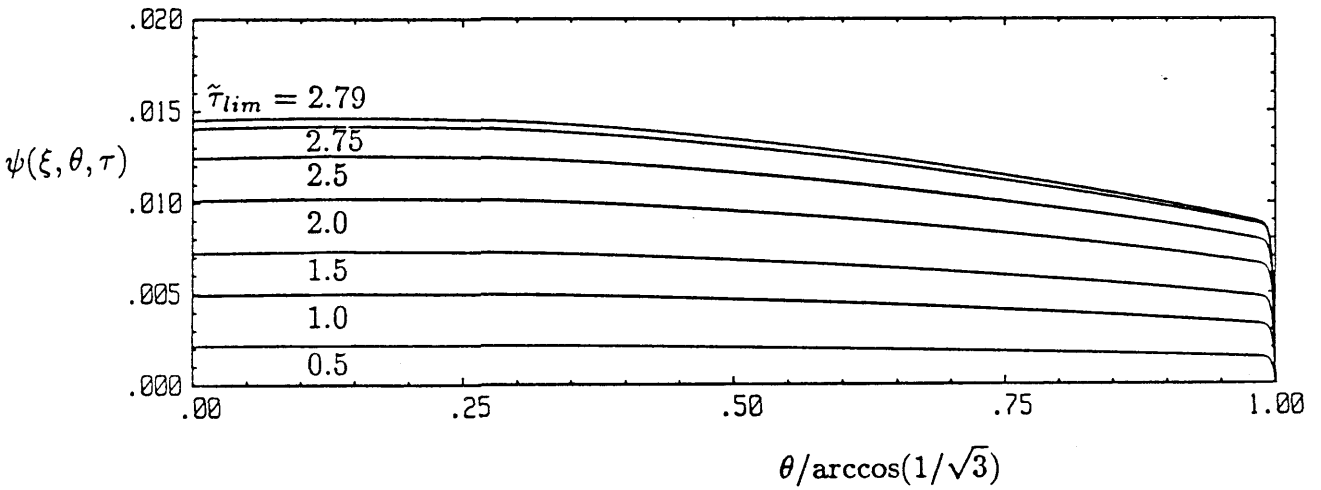


Figura 4.16 Incremento de temperatura en $\xi_\infty = 25$ para distintos valores de $\tilde{\tau}$ ($\theta_o = \arccos(1/\sqrt{3})$).

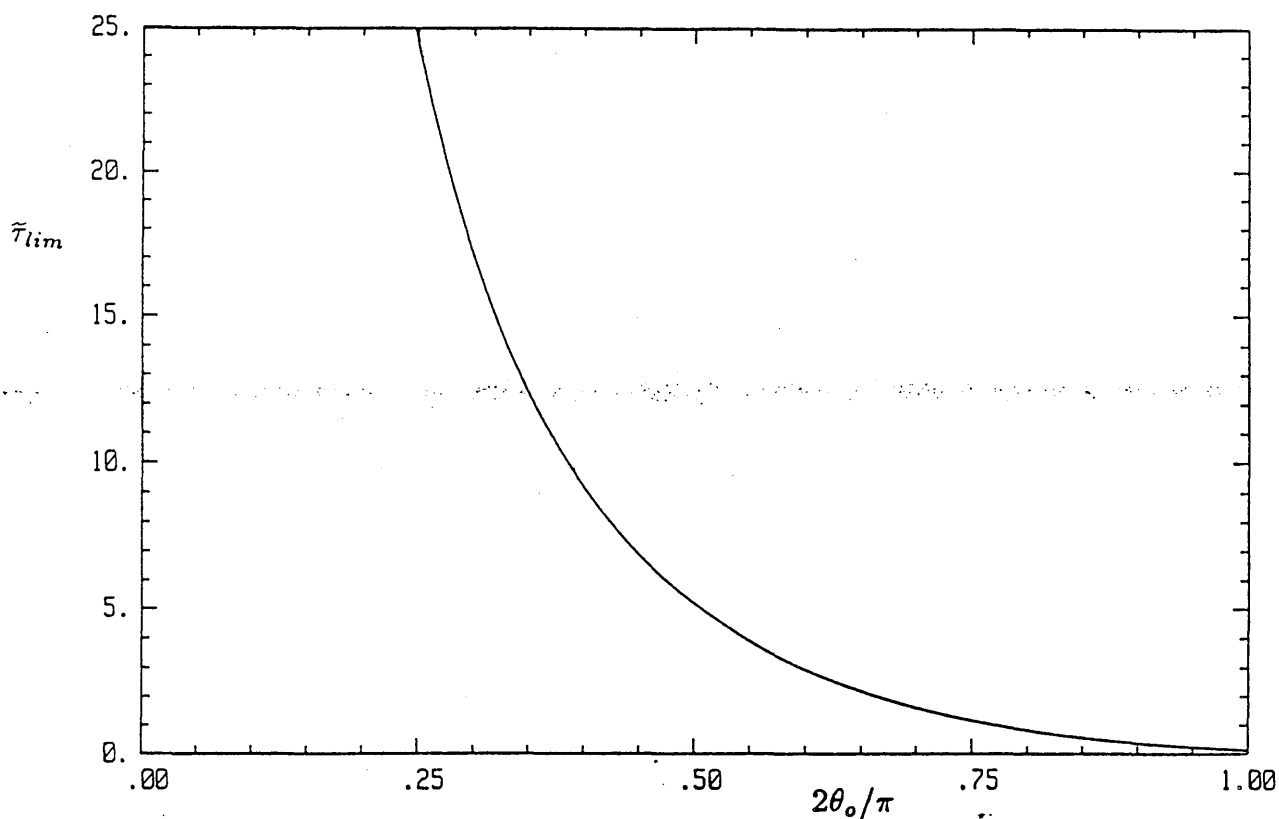


Figura 4.17 Valores máximos de $\tilde{\tau}$, $\tilde{\tau}_{lim}(\theta_o)$, para los que el problema (4.24) admite solución.

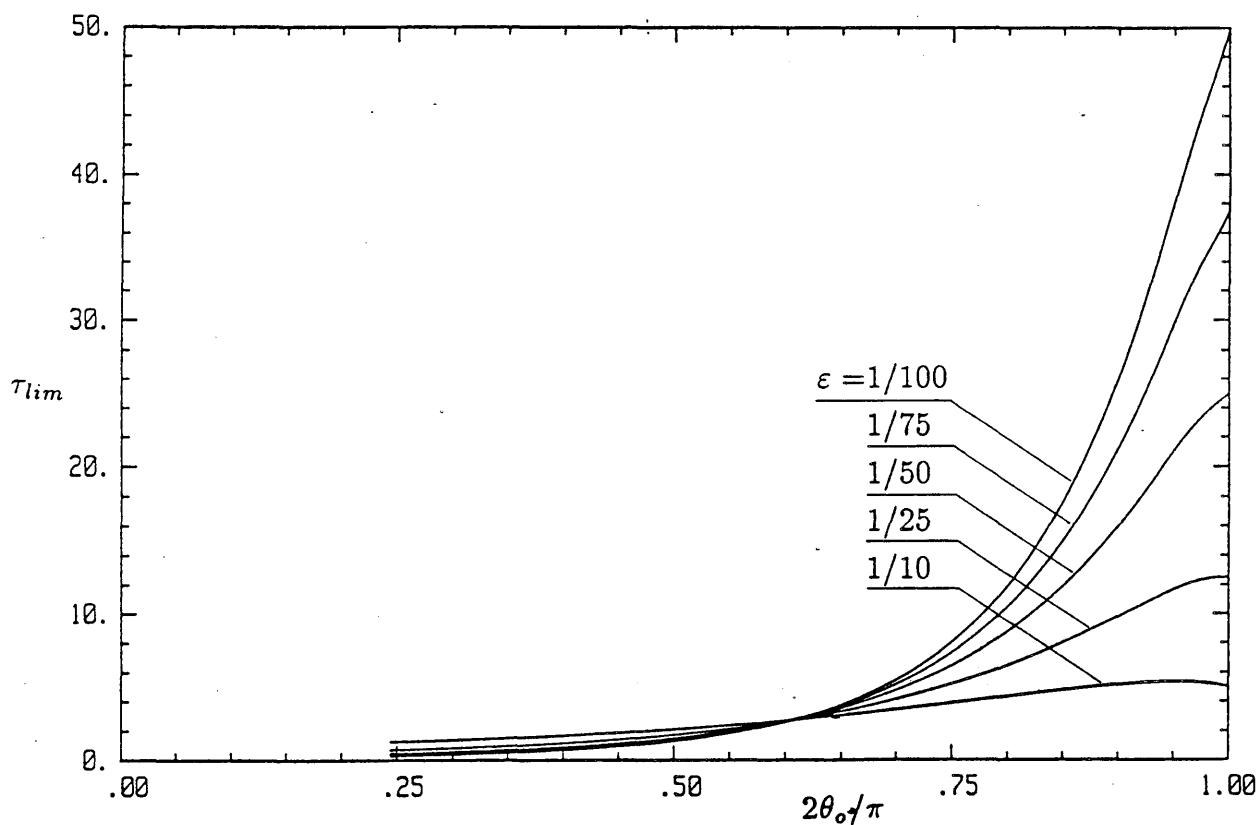


Figura 4.18 Tiempo adimensional de ignición $\tau_{lim} = \tilde{\tau}_{lim}/f(\epsilon, \nu)$ correspondiente al cono.

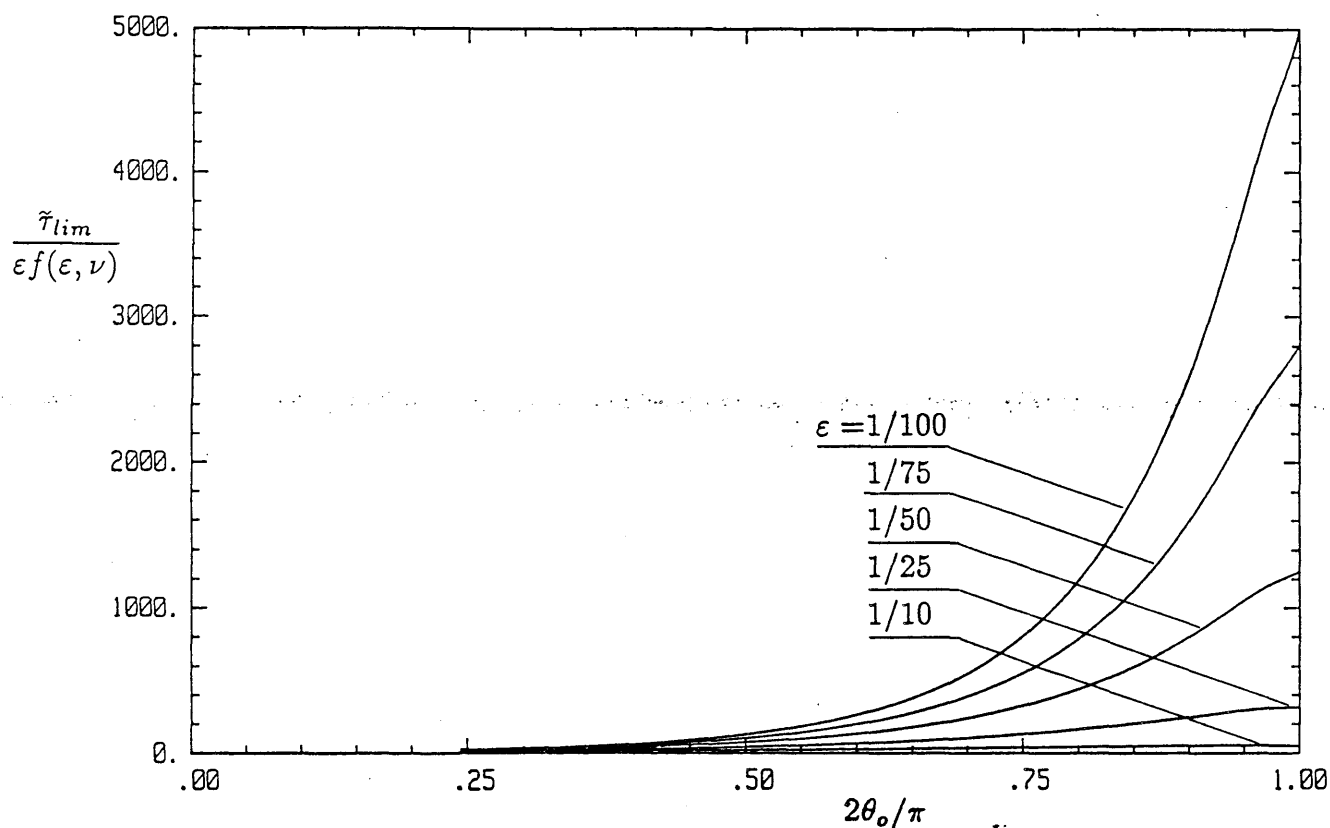


Figura 4.19 Relación entre el tiempo de ignición correspondiente al cono y el tiempo químico.

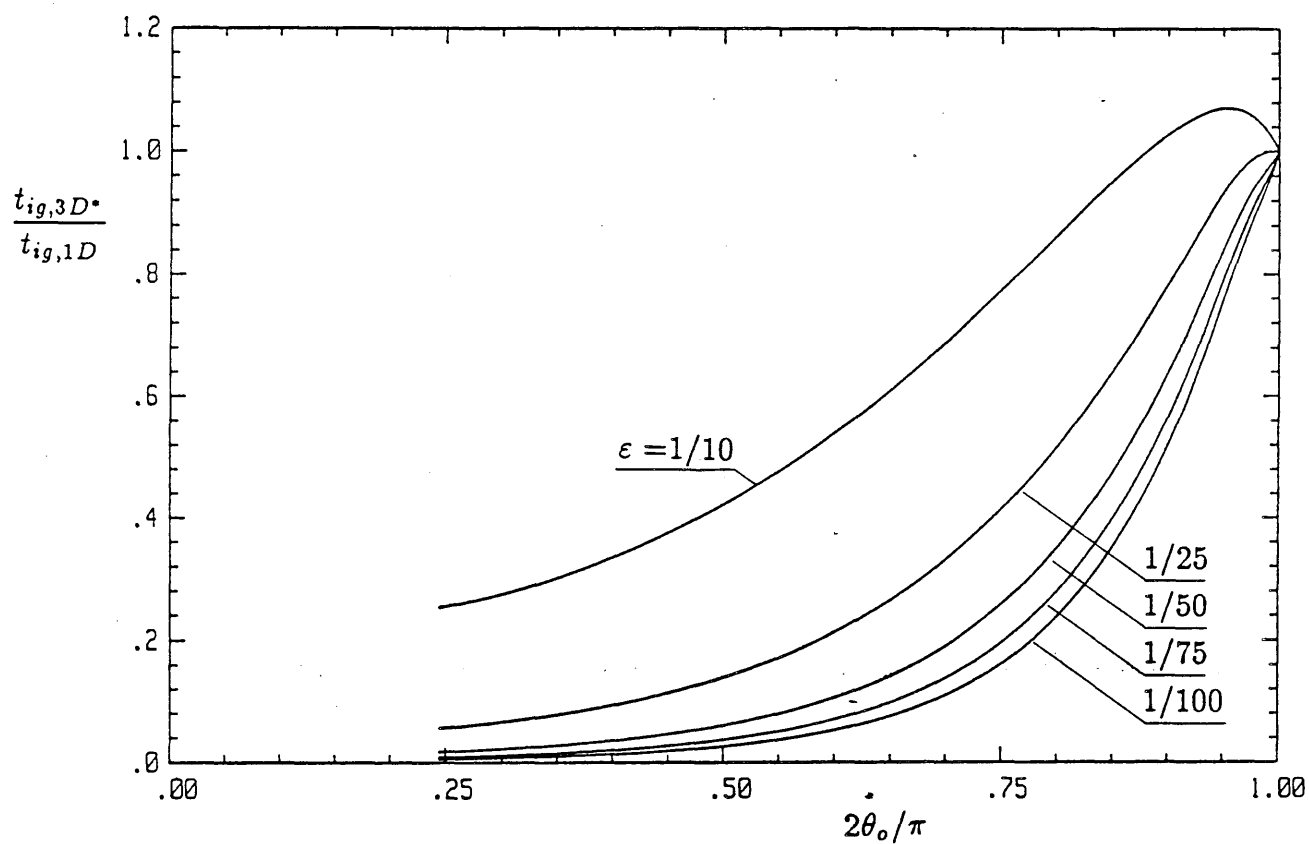


Figura 4.20 Relación entre el tiempo de ignición del cono y el del caso plano.

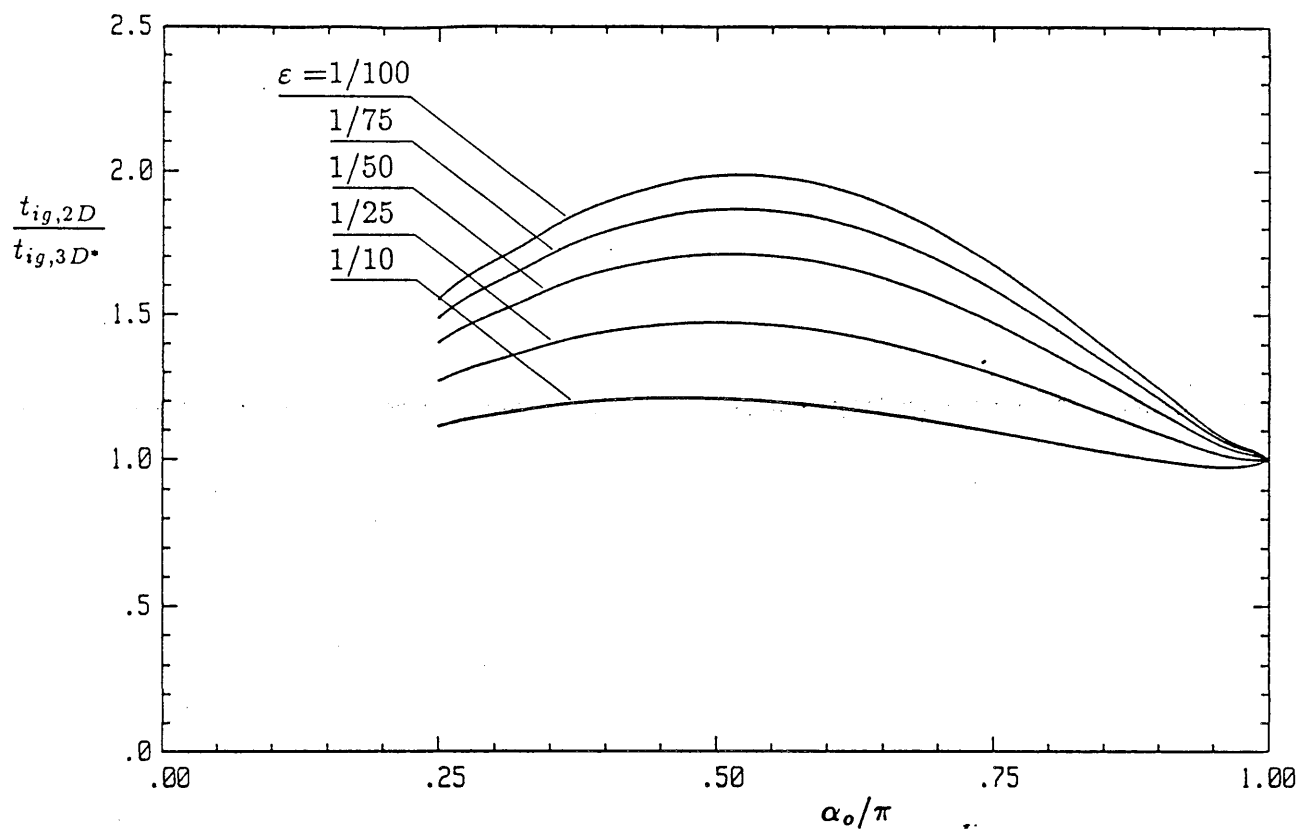


Figura 4.21 Relación entre el tiempo de ignición de una cuña y el de un cono para un mismo valor del ángulo en el vértice.

APENDICE 4.1

IGNICION EN UNA ESQUINA TRIDIMENSIONAL. FORMULACION

El objetivo de este apéndice es formular el problema que habría que resolver para analizar la ignición en un sólido semiinfinito que ocupase la región del espacio definida por $x > 0$, $y > 0$, $z > 0$. El resultado más interesante será el orden de magnitud del tiempo de ignición que permitirá realizar una comparación con los casos unidimensional y bidimensional.

Una vez adimensionalizada la ecuación de conservación de la energía con las hipótesis y variables características usuales se obtiene:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \Delta \varphi + \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right]$$

$$\varphi(x, y, z, 0) = 0$$

$$\varphi(0, y, z, t) = \varphi(x, 0, z, t) = \varphi(x, y, 0, t) = 1; \quad \varphi_r(\infty, t) = 0$$

La distribución de temperatura inerte para este caso es la solución de:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \Delta \varphi_i$$

$$\varphi_i(x, y, z, 0) = 0$$

$$\varphi_i(0, y, z, t) = \varphi_i(x, 0, z, t) = \varphi_i(x, y, 0, t) = 1; \quad \varphi_{i,r}(\infty, t) = 0$$

que está dada por:

$$\varphi_i = 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{t}} \right) \cdot \operatorname{erf} \left(\frac{y}{2\sqrt{t}} \right) \cdot \operatorname{erf} \left(\frac{z}{2\sqrt{t}} \right)$$

En puntos próximos al origen y usando coordenadas esféricas puede ponerse:

$$\varphi_i = 1 - \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \left(\frac{r}{2\sqrt{t}} \right)^3 \sin^2 \theta \cos \theta \cos \phi \sin \phi + o(r^3)$$

Cuando se toma como variable $\tilde{\psi} = \varphi - \varphi_i$ el término de Arrhenius indica que la zona de reacción está definida por $(r/2\sqrt{t}) = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/3})$ y que en ella $\tilde{\psi} = \mathcal{O}(\varepsilon)$. Llamando $\psi = \tilde{\psi}/\varepsilon$, $\xi = (2/\sqrt{\pi})(r/2\sqrt{t})/\varepsilon^{1/3}$ y $f(\theta, \phi) = \sin^2 \theta \cos \theta \cos \phi \sin \phi$ se llega a:

$$\pi \varepsilon^{1/3} \left(t \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) = \Delta \psi + \frac{\pi t}{\varepsilon^{1/3}} \exp[\psi - \xi^3 f(\theta, \phi)]$$

Cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ el problema es:

$$\Delta\psi + \tau \exp[\psi - \xi^3 f(\theta, \phi)] = 0$$

$$\psi(r, \pi/2, \psi) = \psi(r, \theta, 0) = \psi(r, \theta, \pi/2) = \psi_r(\infty, \theta, \psi) = 0$$

con $\tau = \pi t / \varepsilon^{1/3}$. De nuevo este problema es análogo al de Frank-Kamenetskii, admitiendo solución para valores de τ menores que un cierto valor máximo de orden unidad. Por tanto el orden de magnitud del tiempo de ignición es $\varepsilon^{1/3}$.

Si se toma como referencia el tiempo característico bidimensional para la esquina de ángulo $\pi/2$, t_2 , el tiempo unidimensional es $t_1 = t_2 / \mathcal{O}(\varepsilon)$, mientras que el asociado al triedro es $t_3 = t_2 \cdot \mathcal{O}(\varepsilon)^{1/3}$. El efecto geométrico modifica sustancialmente la ignición unidimensional pero es menos importante cuando se comparan situaciones bi y tridimensionales.

APENDICE 4.2

SOLUCION INERTE PARA EL CONO

Consideremos el problema:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial y} \left((1 - y^2) \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \quad (\text{A.4.2.1a})$$

$$\varphi(r, y, 0) = \varphi(r, y_0, t) - 1 = \varphi_r(\infty, y, t) = 0 \quad (\text{A.4.2.1b})$$

en el dominio definido mediante $r > 0$, $y_0 < y < 1$.

Mediante la transformada de Laplace eliminamos la derivada temporal, de manera que si es

$$\bar{\varphi}(r, y, s) = \int_0^\infty e^{-st} \varphi(r, y, t) dt$$

la ecuación para $\bar{\varphi}$ es:

$$\frac{\partial^2 \bar{\varphi}}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial y} \left((1 - y^2) \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial y} \right) - s \bar{\varphi} = 0$$

con las condiciones:

$$\bar{\varphi}(r, y_0, s) - 1/s = \bar{\varphi}(\infty, y, s) = 0$$

Haciendo $v = \bar{\varphi} - 1/s$ obtenemos:

$$\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial y} \left((1 - y^2) \frac{\partial v}{\partial y} \right) - 1 - sv = 0 \quad (\text{A.4.2.2a})$$

$$v(r, y_0) = v(\infty, y) + \frac{1}{s} = 0 \quad (\text{A.4.2.2b})$$

Podemos considerar a $v(r; y)$ como una función de r con valores en el espacio de funciones V definido mediante:

$$V = \{f \in L^2(y_0, 1), f(y_0) = 0, |f'(1)| < \infty\}$$

Estudiemos a continuación el problema de autovalores

$$\frac{\partial}{\partial y} \left((1 - y^2) \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \lambda^2 u = 0 \quad (\text{A.4.2.3})$$

con $u(y_0) = 0$. Haciendo $y = 2z - 1$ la ecuación anterior se transforma en :

$$z(1 - z)u'' + (1 - 2z)u' + \lambda^2 u = 0$$

que corresponde a la ecuación hipergeométrica [GR, p.1045]:

$$z(1 - z)u'' + [c - (a + b + 1)z]u' - abu = 0$$

con $c = 1$, $a + b = 1$ y $ab = -\lambda^2$. Si $a = -\nu$, las dos soluciones linealmente independientes son las funciones de Legendre de primera y segunda especie, que pueden expresarse mediante las funciones hipergeométricas como [GR, p.1016]:

$$P_\nu(y) = F(-\nu, \nu + 1; 1; (1 - y)/2)$$

$$Q_\nu(y) = \frac{\Gamma(\nu + 1)\Gamma(1/2)}{2^{\nu+1}\Gamma(\nu + 3/2)} \frac{1}{y^{\nu+1}} F\left(\frac{\nu + 2}{2}, \frac{\nu + 1}{2}; \frac{2\nu + 3}{2}; \frac{1}{y^2}\right)$$

Como $Q_\nu(y)$ tiene una singularidad en $y = 1$ la única solución válida es $P_\nu(y)$.

Los autovalores son las raíces positivas de la ecuación $P_\nu(y_0) = 0$. La norma de las autofunciones puede calcularse de la siguiente manera. Sean ν y μ tales que $P_\nu(y_0) = 0$ y $P_\mu(y_0) \neq 0$. Multiplicando por P_μ la ecuación (A.4.2.3) para P_ν y por P_ν la de P_μ y restando ambas obtenemos:

$$P_\nu P_\mu = \frac{1}{(\nu - \mu)(\nu + m + 1)} \left\{ P_\mu \frac{d}{dy} \left((1 - y^2) \frac{dP_\nu}{dy} \right) - P_\nu \frac{d}{dy} \left((1 - y^2) \frac{dP_\mu}{dy} \right) \right\}$$

que integrada entre y_0 y 1 da lugar a:

$$\int_{y_0}^1 P_\nu(y) P_\mu(y) dy = \frac{-(1 - y_0^2)}{\nu + \mu + 1} \frac{dP_\nu(y_0)}{dy} \frac{P_\mu(y_0)}{\mu - \nu}$$

Si calculamos el límite $\mu \rightarrow \nu$ llegamos a:

$$\|P_\nu(y)\|^2 = \int_{y_0}^1 [P_\nu(y)]^2 dy = -\frac{(1 - y_0^2)}{2\nu + 1} \frac{dP_\nu(y_0)}{dy} \frac{dP_\nu(y_0)}{d\nu} \quad (\text{A.4.2.4})$$

Las autofunciones $\omega_\nu(y)$ definidas mediante $\omega_\nu(y) = P_\nu(y)/\|P_\nu(y)\|$ constituyen una base de V respecto de la cual puede escribirse:

$$v(r; y) = \sum_\nu f_\nu(r) \omega_\nu(y). \quad (\text{A.4.2.5})$$

Antes de llevar (A.4.2.5) a (A.4.2.2) necesitamos desarrollar 1 en serie de las funciones $\omega_\nu(y)$:

$$1 = \sum_\nu a_\nu \omega_\nu(y).$$

Los coeficientes a_ν están dados por:

$$a_\nu = \frac{1}{\|P_\nu(y)\|} \int_{y_0}^1 P_\nu(y) dy$$

Teniendo en cuenta [GR, p.794] y [GR, p.1005] la integral anterior puede escribirse como:

$$\int_{y_0}^1 P_\nu(y) dy = \frac{1 - y_0^2}{\nu(\nu + 1)} \frac{dP_\nu(y_0)}{dy}$$

de donde

$$a_\nu = \left[\frac{2\nu + 1}{\nu^2(\nu + 1)^2} \frac{(1 + y_0^2)dP_\nu(y_0)/dy}{-dP_\nu(y_0)/d\nu} \right] \quad (\text{A.4.2.6})$$

Al llevar (A.4.2.5) a (A.4.2.2) se obtiene la siguiente ecuación para cada f_ν :

$$\frac{d^2 f_\nu}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df_\nu}{dr} - \frac{\nu(\nu + 1)}{r^2} f_\nu - s f_\nu - a_\nu = 0 \quad (\text{A.4.2.7})$$

cuya solución puede buscarse de la forma

$$f_\nu(r) = \int_0^\infty g_\nu(\sigma) \frac{J_k(\sigma r)}{\sqrt{\sigma r}} d\sigma$$

expresión que llevada a (A.4.2.7) da lugar a:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{u^2 g_\nu(u)}{\sqrt{ur}} \left\{ J_k''(ur) + \frac{J_k'(ur)}{ur} + \left(1 - \frac{(\nu + 1/2)^2}{(ur)^2} \right) J_k(ur) \right\} du = \\ a_\nu + \int_0^\infty g_\nu(u) \frac{J_k(ur)}{\sqrt{ur}} (s + u^2) du \end{aligned} \quad (\text{A.4.2.8})$$

Tomando $k = \nu + 1/2$ el miembro de la izquierda en la ecuación anterior es nulo y si se tiene en cuenta [GR, p.684] que:

$$\int_0^\infty \frac{J_{\nu+1/2}(\eta)}{\eta^{3/2}} d\eta = \frac{\Gamma(\nu/2)}{\sqrt{2}(\nu + 1)\Gamma((\nu + 1)/2)}$$

(A.4.2.8) es equivalente a:

$$0 = \int_0^\infty J_k(ur) \sqrt{ur} du \left\{ \frac{\sqrt{2}a_\nu(\nu + 1)\Gamma((\nu + 1)/2)}{\Gamma(\nu/2)} \frac{1}{u} + g_\nu(u)(s + u^2) \right\}$$

de donde:

$$g_\nu(u) = -\sqrt{2}a_\nu(\nu + 1) \frac{\Gamma(\frac{\nu+1}{2})}{\Gamma(\frac{\nu}{2})} \frac{1}{u(s + u^2)}$$

Una vez determinadas las funciones f_ν y por tanto la función v se tiene

$$\varphi = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s} + \sum_\nu \omega_\nu(y) \int_0^1 g_\nu(\sigma) \frac{J_{\nu+1/2}(\sigma r)}{\sqrt{\sigma r}} dr \right\}$$

Mediante las transformadas inversas de Laplace de $1/s$ y $1/(s + u^2)$ llegamos a:

$$\varphi(r, y, t) = 1 - \sum_{\nu} \sqrt{2} a_{\nu} (\nu + 1) \frac{\Gamma(\frac{\nu+1}{2})}{\Gamma(\frac{\nu}{2})} \omega_{\nu}(y) \int_0^{\infty} e^{-\frac{\xi^2 t}{r^2}} J_{\nu+\frac{1}{2}}(\xi) \frac{d\xi}{\xi^{3/2}}$$

que puede ponerse como:

$$\varphi(r, y, t) = 1 + \sqrt{2} \sum_{\nu} \frac{2\nu + 1}{\nu} \frac{\Gamma(\frac{\nu+1}{2})}{\Gamma(\frac{\nu}{2})} \frac{P_{\nu}(y)}{dP_{\nu}(y_0)/d\nu} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\xi^2 t}{r^2}} J_{\nu+\frac{1}{2}}(\xi) \frac{d\xi}{\xi^{3/2}}$$

El desarrollo de φ para $r \ll 1$ puede obtenerse a partir del desarrollo de $J_{\nu+\frac{1}{2}}$ pues cada uno de los integrandos de (A.4.2.9) es exponencialmente pequeño cuando $\xi = \mathcal{O}(1)$. Por tanto con $J_{\nu+\frac{1}{2}}(\xi) = (\xi/2)^{\nu+\frac{1}{2}}/\Gamma(\frac{\nu+3}{2})$ se obtiene

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{\xi^2 t}{r^2}} J_{\nu+\frac{1}{2}}(\xi) \frac{d\xi}{\xi^{3/2}} \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma(\nu/2)}{(2\nu + 1)\Gamma(\nu + 1/2)} \left(\frac{r}{2\sqrt{t}} \right)^{\nu}$$

con lo cual

$$\varphi(r \ll 1, y, t) \simeq 1 - \frac{2}{\pi} k(\nu) P_{\nu}(y) \left(\frac{r}{2\sqrt{t}} \right)^{\nu}$$

siendo ν el real más pequeño que verifica $P_{\nu}(y_0) = 0$ y $k(\nu)$:

$$k(\nu) = -\frac{\pi}{2} \frac{\Gamma(\frac{\nu+1}{2})}{\nu\Gamma(\nu + 1/2)} \left[\frac{dP_{\nu}(y_0)}{d\nu} \right]^{-1}$$

Otro método para localizar la solución de (A.4.2.1) es observar que admite solución de semejanza de la forma $\varphi = \varphi(\xi, y)$ siendo $\xi = r/\sqrt{t}$ la variable de semejanza, de manera que φ satisface la ecuación

$$-\frac{\xi}{2} \varphi_{\xi} = \varphi_{\xi\xi} + \frac{2}{\xi} \varphi_{\xi} + \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial y} \left((1 - y^2) \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)$$

y las condiciones de contorno

$$\varphi(\xi, y_0) - 1 = \varphi(\infty, y) = 0$$

que puede resolverse mediante el método de separación de variables.

APENDICE 4.3

DESARROLLO DE $f(x)$ EN SERIE DEL SUBCONJUNTO DE FUNCIONES DE LEGENDRE QUE VERIFICAN $P_\nu(y_0) = 0$

Las funciones de Legendre $P_\nu(y_0)$ tales que $P_\nu(y_0) = 0$ forman el conjunto de autofunciones asociadas al problema de Sturm-Liouville

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{du}{dx} \right) + \lambda^2 u = 0 \quad (\text{A.4.3.1})$$

con $u(y_0) = 0$ ($0 < y_0 < 1$). Los autovalores correspondientes son $\lambda^2 = \nu(\nu+1)$, siendo ν las raíces positivas de $P_\nu(y_0) = 0$.

Un resultado general de la teoría de autofunciones y autovalores [CH, pp. 424-427], [TI, pp. 19-21] muestra que el conjunto de funciones

$$V = \{ \omega_\nu(x) = P_\nu(x) / \|P_\nu(x)\|, P_\nu(y_0) = 0 \}$$

constituye un sistema ortonormal completo de $L^2(y_0, 1)$ respecto del cual toda $f(x) \in L^2(y_0, 1)$ puede expresarse mediante

$$f(x) = \sum_{\nu} b_{\nu} P_{\nu}(x) \quad (\text{A.4.3.2})$$

siendo

$$b_{\nu} = \frac{1}{\|P_{\nu}(x)\|} \int_{y_0}^1 f(x) P_{\nu}(x) dx \quad (\text{A.4.3.3})$$

y

$$\|P_{\nu}(x)\|^2 = \int_{y_0}^1 [P_{\nu}(x)]^2 dx \quad (\text{A.4.3.4})$$

Supongamos ahora que $f(x)$ no está definida de manera explícita sino únicamente se conoce su valor en $n+1$ puntos $y_0 = x_0 < x_i < x_{n+1} = 1$ ($i = 1, \dots, n$) siendo $f(x_0) = 0$.

El problema de calcular los coeficientes b_k se reduce a calcular numéricamente las integrales que aparecen en (A.4.3.3) y (A.4.3.4). En el apéndice A.4.2 hemos encontrado (A.4.2.4) que ésta última puede expresarse mediante

$$\int_{y_0}^1 P_{\nu}(x)^2 dx = -\frac{1-y_0^2}{2\nu+1} \frac{dP_{\nu}(y_0)}{dx} \frac{P_{\nu}(y_0)}{d\nu} \quad (\text{A.4.3.5})$$

El factor $(1 - y_o)dP_\nu(y_o)/dx$ puede calcularse mediante la diferencia $(\nu + 1)y_oP_\nu(y_o) - \nu P_{\nu+1}(y_o)$ [GR, p.1005] y $dP_\nu(y_o)/d\nu$ puede aproximarse por:

$$\frac{dP_\nu(y_o)}{d\nu} \simeq \frac{1}{3h} \left[\frac{1}{4} (P_{\nu-2h}(y_o) - P_{\nu+2h}(y_o)) + 2(P_{\nu+h}(y_o) - P_{\nu-h}(y_o)) \right] \quad (\text{A.4.3.6})$$

siendo $h \ll 1$, lo que completa el cálculo de $\|P_\nu(y_o)\|$.

Para calcular la integral de (A.4.3.3) descomponemos ésta en la suma de integrales sobre los intervalos $[x_i, x_{i+1}]$ ($i = 0, \dots, n$):

$$\int_{y_o}^1 f(x)P_\nu(x)dx = \sum_{i=0}^n \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)P_\nu(x)dx \quad (\text{A.4.3.7})$$

En cada uno de estos intervalos aproximamos $f(x)$ por el segmento de spline cúbico correspondiente:

$$f(x) \simeq s_i(x) = c_{0,i} + c_{1,i}\xi + c_{2,i}\xi^2 + c_{3,i}\xi^3 \quad (\text{A.4.3.8})$$

con $\xi = (x - x_i)/(1 - y_o)$ y $x \in [x_i, x_{i+1}]$.

De manera que

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)P_\nu(x)dx = \sum_{j=0}^3 \frac{c_{j,i}}{(1 - y_o)^j} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i)^j P_\nu(x)dx \quad (\text{A.4.3.9})$$

Las integrales anteriores pueden calcularse manipulando adecuadamente la ecuación diferencial (A.4.3.1). Si llamamos:

$$I(j, i, k) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i)^j P_\nu(x)dx \quad (\text{A.4.3.10})$$

siendo ν el k -ésimo autovalor, los resultados que se obtienen son:

$$\begin{aligned} I(0, i, k) &= \frac{1}{\nu(\nu+1)} \left[(1 - x_i^2) \frac{P_\nu(x_i)}{dx} - (1 - x_{i+1}^2) \frac{P_\nu(x_{i+1})}{dx} \right] \\ I(j, i, k) &= \frac{1}{(\nu+j+1)(\nu-j)} \left[j(x_{i+1} - x_i)^{j-1} (1 - x_{i+1}^2) P_\nu(x_{i+1}) \right. \\ &\quad + 2j^2 x_i I(j-1, i, k) - j(j-1)(1 - x_i^2) I(j-2, i, k) \\ &\quad \left. - (x_{i+1} - x_i)^j (1 - x_{i+1}^2) \frac{dP_\nu(x_{i+1})}{dx} \right] \quad (j = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (\text{A.4.3.11})$$

Si $\nu = j$ una de las expresiones anteriores no es válida, pero la integral puede calcularse directamente pues las funciones $P_\nu(x)$ son ahora polinomios:

$$I(1, i, 1) = \frac{1}{3}(x_{i+1}^3 - x_i^3) - \frac{x_i}{2}(x_{i+1}^2 - x_i^2)$$

$$I(2, i, 2) = \frac{3}{10}(x_{i+1}^5 - x_i^5) - \frac{3}{4}x_i(x_{i+1}^4 - x_i^4) - \frac{1}{2}\left(x_i^2 - \frac{1}{3}\right)(x_{i+1}^3 - x_i^3) \\ + \frac{1}{2}x_i(x_{i+1}^2 - x_i^2) - \frac{1}{2}x_i^2(x_{i+1} - x_i)$$

$$I(3, i, 3) = \frac{5}{14}(x_{i+1}^7 - x_i^7) - \frac{5}{4}x_i(x_{i+1}^6 - x_i^6) + \frac{1}{2}(3x_i^2 - \frac{3}{5})(x_{i+1}^5 - x_i^5) \\ + \frac{9x_i - 5x_i^3}{8}(x_{i+1}^4 - x_i^4) - \frac{3}{2}x_i^2(x_{i+1}^3 - x_i^3) + \frac{3}{4}x_i^3(x_{i+1}^2 - x_i^2)$$

Una vez calculados los elementos $I(j, i, k)$ la integral puede expresarse como

$$\int_{y_0}^1 P_\nu(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^n \left\{ \sum_{j=0}^3 c_{j,i} I(j, i, k) \right\}$$

lo que permite calcular los coeficientes b_ν del desarrollo de $f(x)$ en serie de las funciones $P_\nu(y)$.

CAPITULO 5

IGNICION EN SOLIDOS FINITOS

5.1 INTRODUCCION

La ignición de sólidos finitos con simetría de revolución (cilindros y esferas) producida por el aumento de la temperatura superficial ha sido considerada previamente en diversos trabajos. Merzhanov *et al.* [MAG] estudian la ignición integrando numéricamente la ecuación de conservación de la energía, suponiendo que tanto el número de Damkhöler como la energía de activación son finitos y de orden unidad o, a lo sumo, moderadamente grandes. Posteriormente Poland *et al.* [PHK] realizan un análisis parecido considerando grandes energías de activación, pero todavía con números de Damkhöler tales que la reacción sigue teniendo importancia en el interior del sólido lejos de la superficie. Sin embargo en la condición inicial que imponen a la temperatura ($-\theta_0 = -E(T_s - T_o)/RT_s \simeq 10$) está implícita la hipótesis de que la temperatura inicial es próxima a la crítica y por tanto muy superior, en general, a la ambiente. Obsérvese que formalmente debería ser $-\theta_0 \rightarrow -\infty$ si $T_s - T_o = \mathcal{O}(1)$.

El número de Damköhler que caracteriza la importancia relativa de los términos de reacción química frente a los de conducción en la ecuación de la energía es:

$$D_a = \frac{a^2 \rho q B E e^{-E/RT_c}}{\lambda R T_c^2}$$

donde a y T_c representan, respectivamente, la longitud y temperatura características del sólido. Este parámetro puede interpretarse como el cociente entre los tiempos de conducción y químico o de explosión homogénea, o bien como el cuadrado del cociente entre la longitud característica del sólido y el tamaño de la zona de reacción o distancia de penetración de los efectos químicos. La teoría de Frank-Kamenetskii determina un valor crítico de D_a de orden unidad por encima del cual se produce la explosión térmica a consecuencia de la no existencia de soluciones estacionarias de la ecuación

de la energía. Para un sólido dado, y por tanto con unos parámetros físico-químicos conocidos, su estado inicial, caracterizado por una temperatura T_c igual a la ambiente, debe razonablemente ser muy subcrítico. Por consiguiente el valor de D_a calculado a la temperatura ambiente debe ser mucho menor que el valor crítico, es decir $D_a \ll 1$, lo que significa que el tiempo químico es mucho mayor que el de conducción. Esta situación puede modificarse aumentando bruscamente la temperatura superficial hasta un valor T_s , que se mantiene constante posteriormente, tal que el número de Damköhler a esa temperatura sea mayor que el crítico. Si D_a es suficientemente grande se inicia la reacción en una capa superficial muy delgada, produciéndose la ignición en un tiempo corto frente al de conducción, con lo cual la capa calentada por efecto del incremento de temperatura superficial es delgada y con su escala el sólido aparece como infinito. Esta es la hipótesis bajo la cual se han realizado los análisis de los capítulos precedentes.

Para números de Damköhler más pequeños que los anteriores, pero siendo todavía $D_a \gg 1$, el tiempo de ignición aumenta, pudiendo llegar a ser del mismo orden que el de conducción. En estas condiciones la zona de reacción se mantiene como una capa superficial delgada pero la ignición se produce cuando la onda térmica generada por el incremento de temperatura superficial está alcanzando la región central del sólido. El espesor de la capa de conducción es ahora comparable a la longitud característica del sólido, lo que obliga a incluir los efectos del tamaño finito y de la forma geométrica en la distribución de temperatura de la zona inerte. En el curso del análisis determinaremos que en este límite distinguido $D_a = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$ en sólidos con aristas y $D_a = \mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ si su superficie no presenta singularidades.

Cuando el número de Damköhler es superior al crítico y de orden unidad también se produce la ignición, pero ahora la zona de reacción se extiende sobre una parte importante del sólido, no pudiendo considerarse como una capa superficial. El estudio de la estructura de la zona de reacción debe incluir todos los factores geométricos que intervienen y no puede reducirse a un problema universal.

El objetivo de este capítulo es analizar la ignición de sólidos finitos mediante técnicas asintóticas basadas en grandes energías de activación. Como anteriormente, aprovecharemos la existencia de soluciones analíticas para la distribución de temperatura inerte, que permitirán describir adecuadamente la etapa inicial de calentamiento. En los casos en que el número de Damköhler sea grande frente a la unidad la zona de reacción es muy delgada y su estructura es análoga a la encontrada en los sólidos

infinitos, si bien es necesario redefinir las variables para tener en cuenta la diferente distribución de temperatura inerte, e incluir así el efecto del espesor de la capa de conducción que ya no es necesariamente pequeño frente al tamaño del sólido. No será preciso, por tanto, realizar la integración de la ecuación correspondiente a la zona de reacción y podrán aprovecharse los resultados obtenidos previamente. Cuando $D_a = \mathcal{O}(1)$ la zona de reacción es de tamaño similar al del sólido siendo necesario realizar la integración de la ecuación en cada caso particular. El análisis asintótico mostrará la existencia de dos etapas; durante la primera tiene lugar el calentamiento del sólido y la temperatura está dada por la distribución inerte, lo que permite determinar su duración, mientras que en la segunda interviene la reacción química y es la ecuación correspondiente a esta etapa, en la que sólo aparece el número de Damköhler como parámetro, la que debe integrarse. De esta forma se resuelve además la dificultad asociada a la condición inicial en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$.

5.2 IGNICION EN SOLIDOS RECTANGULARES

5.2.1 Formulación y adimensionalización

Consideremos, como ejemplo de la ignición en sólidos con esquinas, el caso de un sólido de sección rectangular $\tilde{\Omega}$ cuyos lados son a y $b = \ell \cdot a$ ($\ell \geq 1$). Inicialmente su temperatura es T_o y en $t = 0$ la temperatura de la superficie pasa a ser $T_s > T_o$ manteniéndose constante para $t > 0$. Suponemos además que T_s es mayor que la temperatura a la cual el número de Damköhler alcanza su valor crítico.

La evolución de la temperatura para $t > 0$ puede describirse mediante el siguiente problema:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \tilde{\Delta} T + \rho q B e^{-E/RT} \quad \text{en } \tilde{\Omega} \quad (5.1a)$$

$$t = 0 : \quad T = T_o \quad \text{en } \tilde{\Omega} \quad (5.1b)$$

$$t > 0 : \quad T = T_s \quad \text{en } \partial \tilde{\Omega} \quad (5.1c)$$

donde el significado de ρ , c_p , λ , q , B , E y R es el mismo que en capítulos anteriores, verificándose análogas hipótesis.

Si realizamos la adimensionalización de la manera usual introduciendo los

parámetros $\alpha = (T_s - T_o)/T_s$ y $\varepsilon = RT_s^2/E(T_s - T_o)$ y definiendo las variables

$$\varphi = (T - T_o)/(T_s - T_o), \quad x = \tilde{x}/a, \quad y = \tilde{y}/a, \quad \tau = t/t_c \quad (5.2)$$

se obtiene la siguiente ecuación y condiciones iniciales y de contorno:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \Delta \varphi + \varepsilon \frac{t_c}{t_q} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad \text{en } \Omega =]0, 1[\times]0, \ell[\quad (5.3a)$$

$$\tau = 0: \quad \varphi = 0 \quad \text{en } \Omega \quad (5.3b)$$

$$\tau > 0: \quad \varphi = 1 \quad \text{en } \partial\Omega \quad (5.3c)$$

donde $t_c = \rho c_p a^2 / \lambda$ es el tiempo característico asociado a la conducción de calor y $t_q = c_p RT_s^2 e^{E/RT_s} / B q E$ es el tiempo característico asociado a la reacción química a la temperatura T_s . El cociente t_c/t_q es el número de Damkhöler, D_a , que puede también escribirse como

$$D_a = \frac{a^2}{\frac{\lambda / \rho c_p}{B} \frac{c_p T_s}{q} \frac{RT_s}{E} e^{E/RT_s}} = \left(\frac{a}{\ell_r} \right)^2 \quad (5.4)$$

siendo ℓ_r la longitud típica de la zona de reacción. De (5.3a) es evidente que el término de reacción sólo interviene si $\varphi - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$ y, por tanto, mientras sea $\varphi - 1 = \mathcal{O}(1)$ la distribución de temperatura será la misma que existiría si el sólido no fuese reactivo. Esta distribución inerte, que desempeñará un papel importante, está dada por [CJ, p.173]:

$$\varphi_i = 1 - \frac{16}{\pi^2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{\exp \left[- \left\{ (2n+1)^2 + \left(\frac{2m+1}{\ell} \right)^2 \right\} \pi^2 \tau \right]}{(2n+1)(2m+1)} \times \\ \sin(2n+1)\pi x \sin(2m+1)\frac{\pi y}{\ell} \quad (5.5)$$

La expresión anterior es apropiada para $\tau = \mathcal{O}(1)$ pues el término exponencial hace que la convergencia sea muy rápida. Sin embargo para $\tau \ll 1$ la convergencia es muy lenta y es necesario emplear otra expresión equivalente. Para ello utilizamos la identidad

$$\frac{4}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2m+1} \sin(2m+1)\frac{\pi y}{\ell} \exp \left[- \frac{(2m+1)^2 \pi^2 \tau}{\ell^2} \right] = \\ \operatorname{erfc} \left(\frac{-y}{2\sqrt{\tau}} \right) - \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{m\ell + y}{2\sqrt{\tau}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{m\ell - y}{2\sqrt{\tau}} \right) \right]$$

que se encuentra al resolver la ecuación del calor unidimensional en $[0, \ell]$. La serie doble que interviene en (5.5) es absolutamente convergente y puede expresarse como producto de dos series, es decir:

$$\frac{16}{\pi^2} \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{\exp \left[- \left\{ (2n+1)^2 + \left(\frac{2m+1}{\ell} \right)^2 \right\} \pi^2 \tau \right]}{(2n+1)(2m+1)} \operatorname{sen}(2n+1)\pi x \operatorname{sen}(2m+1)\frac{\pi y}{\ell} =$$

$$\left\{ \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-(2n+1)^2 \pi^2 \tau}}{2n+1} \operatorname{sen}(2n+1)\pi x \right\} \left\{ \frac{4}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{e^{-(2m+1)^2 \pi^2 \tau / \ell^2}}{2m+1} \operatorname{sen}(2m+1)\frac{\pi y}{\ell} \right\}.$$

y mediante la equivalencia anterior (5.5) se transforma en:

$$\begin{aligned} \varphi_i &= 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\tau}} \right) \cdot \operatorname{erf} \left(\frac{y}{2\sqrt{\tau}} \right) \\ &+ \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\tau}} \right) \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{m\ell + y}{2\sqrt{\tau}} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{m\ell - y}{2\sqrt{\tau}} \right) \right] \\ &+ \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2\sqrt{\tau}} \right) \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{n+x}{2\sqrt{\tau}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{n-x}{2\sqrt{\tau}} \right) \right] \\ &- \sum_{m,n=1}^{\infty} (-1)^{n+m} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{n+x}{2\sqrt{\tau}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{n-x}{2\sqrt{\tau}} \right) \right] \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{m\ell + y}{2\sqrt{\tau}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{m\ell - y}{2\sqrt{\tau}} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.6)$$

Para valores de $\tau \ll 1$ y de x e y tales que $1-x = \mathcal{O}(1)$, $\ell-y = \mathcal{O}(1)$ los términos que figuran en el interior de los corchetes en (5.6) son despreciables de manera que

$$\varphi_i \simeq 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\tau}} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{y}{2\sqrt{\tau}} \right) \quad (\tau \ll 1) \quad (5.7)$$

mientras que para $\tau = \mathcal{O}(1)$ puede ponerse a partir de (5.5):

$$\varphi_i \simeq 1 - \frac{16}{\pi^2} e^{-\pi^2(1+1/\ell^2)\tau} \operatorname{sen} \pi x \operatorname{sen} \frac{\pi y}{\ell} \quad (\tau = \mathcal{O}(1)) \quad (5.8)$$

Si x e y son pequeños frente a la unidad (5.5) siempre puede escribirse como:

$$\varphi_i = 1 - xy A(\tau, \ell) + o(xy) \quad (5.9)$$

siendo

$$A(\tau, \ell) = \frac{16}{\ell} \sum_{m,n=0}^{\infty} \exp \left\{ - \left[(2n+1)^2 + \left(\frac{2m+1}{\ell} \right)^2 \right] \pi^2 \tau \right\} \quad (5.10)$$

que a su vez admite las siguientes aproximaciones según se deduce de (5.7) y (5.8)

$$A(\tau, \ell) \simeq \frac{1}{\pi\tau} \quad (\tau \ll 1) \quad (5.11)$$

$$A(\tau, \ell) \simeq \frac{16}{\ell} \exp [-(1 + 1/\ell^2)\pi^2\tau] \quad (\tau = \mathcal{O}(1)) \quad (5.12)$$

Obsérvese que el factor $1/\pi\tau$ en (5.11) es el mismo que se obtiene al considerar la solución inerte cuando el sólido es infinito.

La figura 5.1 representa las gráficas de $A(\tau, \ell)$ y de $1/\pi\tau$. De ella se deduce que para $\tau < .05$ la aproximación $A \simeq 1/\pi\tau$ está totalmente justificada y que A varía muy poco con ℓ , de forma que para $\ell > 2$ las gráficas se confunden en una.

La aproximación (5.12) y las gráficas de $A(\tau, \ell)$ están dibujadas en la figura 5.2. Se observa que cuando $\ell = 1$ ésta es válida para $\tau > .06$ mientras que si $\ell \geq 2$, τ debe ser mayor que .3 en cuyo caso (5.12) es prácticamente independiente de ℓ .

5.2.2 Número de Damköhler $D_a \gg 1$

Cuando $D_a \gg 1$ la zona de reacción es muy delgada y está situada cerca de la superficie exterior. Fuera de esta zona la temperatura es la inerte, de forma que si utilizamos como variables $\tilde{\psi} = \varphi - \varphi_i$ y hacemos uso de las condiciones de simetría el problema (5.3) puede formularse como:

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tau} = \Delta \tilde{\psi} + \varepsilon D_a \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\tilde{\psi} - (1 - \varphi_i)}{1 + \alpha(\tilde{\psi} - 1 + \varphi_i)} \right] \quad (5.13a)$$

$$\tilde{\psi}(x, y, 0) = 0 \quad (5.13b)$$

$$\tilde{\psi}(0, y, \tau) = \tilde{\psi}(x, 0, \tau) = \tilde{\psi}_x(1/2, y, \tau) = \tilde{\psi}_y(x, 1/2, \tau) = 0 \quad (5.13c)$$

La ecuación (5.13a) muestra que en la zona de reacción $\tilde{\psi}$ debe ser de orden ε y que ésta está situada donde $x, y \ll 1$ y tales que $1 - \varphi_i = \mathcal{O}(\varepsilon)$, por tanto las variables apropiadas, teniendo en cuenta (5.9), son:

$$\psi = \tilde{\psi}/\varepsilon; \quad (\xi, \eta) = (x, y)\sqrt{A(\tau, \ell)/\varepsilon} \quad (5.14)$$

que llevadas a la ecuación (5.13a) y después de desarrollar el exponente del término de reacción transforman ésta en:

$$\varepsilon \left[\frac{1}{A} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{1}{2A^2} \frac{dA}{d\tau} \left(\xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) \right] = \Delta \psi + \frac{\varepsilon D_a}{A} [\exp(\psi - \xi\eta)] + o(\varepsilon) \quad (5.15)$$

Los términos situados a la izquierda representan las variaciones temporales de ψ debidas a su propia derivada temporal y al efecto convectivo no estacionario asociado a la zona de reacción. Esta se expande a causa de que al ser $A(\tau, \ell)$ una función decreciente del tiempo los valores de x e y para los que $xyA(\tau, \ell)$ es de orden ε son cada vez más grandes. Este hecho es consecuencia directa del avance de la onda térmica que conforme transcurre el tiempo amplía la región donde $1 - \varphi_i = \mathcal{O}(\varepsilon)$.

Para los valores de τ en que ε/A y $\varepsilon A_\tau/2A^2$ son despreciables frente a la unidad el problema a resolver es:

$$\Delta\psi + \frac{\varepsilon D_a}{A} \exp[\psi - \eta\xi] = 0 \quad (5.16a)$$

$$\psi(\xi, \eta) = \psi(\xi, 0) = \psi_\xi(\infty, \eta) = \psi_\eta(\xi, \infty) = 0 \quad (5.16b)$$

que es el problema resuelto en el capítulo 3, expresado ahora en coordenadas cartesianas y que admite solución siempre que:

$$\frac{\varepsilon D_a}{A} < 2.547 \dots \quad (5.17)$$

Por tanto la relación que verifican el tiempo de ignición τ_{ig} , el parámetro ε , el número de Damkhöler D_a y la relación de esbeltez es:

$$2.547 A(\tau_{ig}, \ell) = \varepsilon D_a \quad (5.18)$$

Para $\varepsilon D_a \gg 1$ la función $A(\tau, \ell)$ está dada por (5.11) con lo cual:

$$\tau_{ig} = \frac{2.547}{\pi \varepsilon D_a}$$

o bien en variables físicas:

$$t_{ig} = 2.547 \frac{c_p(T_s - T_0)}{\pi q B e^{-E/RT_s}} \quad (5.19a)$$

que coincide con el valor determinado en el capítulo 3 al analizar la ignición en una esquina, pues el tiempo de ignición adimensional es pequeño y la distancia que ha penetrado la onda térmica en el sólido, es decir, el espesor de la capa de conducción es también pequeño frente al tamaño del sólido lo que hace que éste aparezca como infinito. En este caso los resultados de los capítulos 3 y 4 son directamente aplicables. Si $\varepsilon D_a = \mathcal{O}(1)$ el valor de $A(\tau_{ig}, \ell)$ es de orden unidad y por tanto $\tau_{ig} = \mathcal{O}(1)$. Este es el límite distinguido en que siendo la zona de reacción delgada pues $D_a \sim 1/\varepsilon \gg 1$ la onda térmica se ha propagado a distancias comparables al tamaño del sólido, de forma

que el tiempo de ignición depende, a través de la temperatura inerte, de las dimensiones a y b como puede comprobarse al obtener la expresión de t_{ig} a partir de (5.18) con A dada por (5.12):

$$t_{ig} = \frac{\rho c_p a b / \lambda}{\pi_2 (a/b + b/a)} \ln \left\{ 2.547 \frac{16\lambda(T_s - T_o)}{ab\rho q B e^{-E/RT_s}} \right\} \quad (5.19b)$$

Nótese que en ambos casos se mantiene la estructura de la zona de reacción correspondiente a la esquina, siendo la distribución de temperatura inerte, que sí está afectada por el tamaño finito del sólido, la que mediante la función $A(\tau, \ell)$ modifica los resultados.

Este modelo constituye, una vez más, una descripción cuasiestacionaria de la zona de reacción mediante el empleo de variables (ξ, η) adecuadas. Su validez está condicionada a que se verifiquen las desigualdades: $\varepsilon/A \ll 1$ y $(\varepsilon/2A^2)|dA/d\tau| \ll 1$ en el intervalo $[0, \tau_{ig}]$. A partir de la expresión (5.10) es fácil deducir que $|A_\tau|/2A > \pi^2/2 > 1$, de manera que si admitimos que los términos $\partial\psi/\partial\tau$, $\xi(\partial\psi/\partial\xi)$ y $\eta(\partial\psi/\partial\eta)$ son de orden unidad es el factor $\varepsilon|A_\tau|/2A^2$ el que determina el fallo del modelo. Este se produce si, una vez determinado τ_{ig} mediante (5.18), en algún punto del intervalo $[0, \tau_{ig}]$ se alcanza la condición $\varepsilon|A_\tau|/2A^2 = \mathcal{O}(1)$. Para los valores de τ en que esto ocurre la función $A(\tau, \ell)$ puede representarse muy aproximadamente por (5.12) con lo cual:

$$\frac{\varepsilon|A_\tau|}{2A^2} \sim \frac{\pi^2(1 + 1/\ell^2)}{2} \frac{\varepsilon}{A}$$

y, por tanto, el fallo tiene lugar cuando

$$A(\tau, \ell) \sim \frac{\pi^2}{2}(1 + 1/\ell^2)\varepsilon$$

En consecuencia (5.17) determina correctamente el tiempo de ignición si

$$A(\tau_{ig}, \ell) \gg \frac{\pi^2}{2}(1 + 1/\ell^2)\varepsilon \quad (5.20a)$$

o, de forma equivalente, si

$$\tau_{ig} \ll \frac{\ln \left[\frac{32}{\pi^2(1 + 1/\ell^2)} \frac{1}{\varepsilon} \right]}{\pi^2(1 + 1/\ell^2)} \quad (5.20b)$$

Teniendo en cuenta (5.17) la condición anterior puede expresarse en términos del número de Damkhöler como:

$$D_a \gg \frac{2.547\pi^2}{2}(1 + 1/\ell^2) \simeq 4\pi(1 + 1/\ell^2) \quad (5.21)$$

La figura 5.3, que representa la función $2.547A(\tau_{ig}, \ell)$, puede utilizarse para determinar τ_{ig} una vez conocidos los parámetros ε , ℓ y D_a si éste verifica (5.21).

Si $\varepsilon A_\tau / 2A^2 = \mathcal{O}(1)$ pero $\varepsilon / A \ll 1$ es necesario retener parte de los efectos no estacionarios que aparecen en la zona de reacción aunque todavía es posible despreciar el término $\partial\psi/\partial\tau$. De esta forma, teniendo en cuenta (5.13), el problema a resolver es:

$$\frac{\pi^2(1 + 1/\ell^2)}{2} \frac{\varepsilon}{A} \left(\xi \frac{\partial\psi}{\partial\xi} + \eta \frac{\partial\eta}{\partial\eta} \right) = \Delta\psi + \frac{\varepsilon D_a}{A} \exp[\psi - \xi\eta]$$

con las condiciones de contorno (5.1b). El procedimiento numérico sería similar al ya empleado. Obsérvese que los nuevos términos sólo cuentan cuando τ es próximo al de ignición pues inicialmente $1/A \ll 1$.

Al igual que los capítulos 3 y 4 el valor de τ_{ig} determinado por (5.18) debe considerarse como una primera aproximación obtenida bajo la hipótesis cuasiestacionaria. Esta falla cerca de τ_{ig} cuando $\varepsilon\psi_\tau/A$ no sea despreciable frente a la unidad, debiendo retenerse a partir de ese momento los términos del miembro de la izquierda en 5.15. El análisis de la etapa de transición subsiguiente puede realizarse mediante un procedimiento análogo al del apéndice 3.5. Cuando τ_{ig} sea suficientemente pequeño y $A(\tau, \ell)$ esté correctamente representada por (5.11) se obtiene la misma corrección que entonces. En caso contrario es necesario realizar un análisis particular para $A(\tau, \ell)$ dado por (5.12) lo que permite obtener el valor de la corrección correspondiente que ahora será función de la esbeltez del sólido.

5.2.3 Número de Damkhöler $D_a = \mathcal{O}(1)$

Para valores $D_a = \mathcal{O}(1)$ el tamaño de la zona de reacción es comparable al del sólido y el procedimiento anterior, que aprovechaba el hecho de que la temperatura era la inerte excepto en una capa delgada para generar un problema universal, no es aplicable.

La ecuación (5.3) muestra que el término de reacción no interviene hasta que $\varphi - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$. Con lo cual la temperatura en cada punto del sólido está determinada por la distribución inerte dada por (5.5) hasta que una parte importante del sólido está a una temperatura que difiere de la unidad en cantidades de orden ε , a partir de ese momento la reacción química entra en juego.

Cuando $\varphi_i - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$ la temperatura inerte puede representarse mediante (5.12) en lugar de (5.5), de manera que el tiempo que hay que esperar para que esto

ocurra es del orden de τ_ϵ definido mediante:

$$\tau_\epsilon = \frac{\ln(1/\epsilon)}{\pi^2(1 + 1/\ell^2)} \quad (5.22)$$

cuya gráfica está representada en la figura 5.4.

Debido a la condición de contorno $\varphi = 1$ existe siempre una capa próxima a la pared donde $\varphi - 1 = \mathcal{O}(\epsilon)$ y en la cual debería retenerse el término de reacción incluso para valores de τ menores que τ_ϵ . Sin embargo al ser $D_a = \mathcal{O}(1)$ el tiempo que hay que esperar para notar el efecto de esta pequeña zona de reacción es también del orden del tiempo de conducción y, por tanto, no necesita ser analizada de forma específica.

Si tomamos como variables $\tilde{\tau}$ y ψ definidas mediante

$$\tilde{\tau} = \tau - \tau_\epsilon, \quad \psi = (\varphi - 1)/\epsilon \quad (5.23)$$

el problema a resolver en el límite $\epsilon \rightarrow 0$ es:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tilde{\tau}} = \Delta \psi + D_a e^\psi$$

con la condición de contorno $\psi = 0$ en $\partial\Omega$ y la condición inicial resultante de imponer que cuando $\tilde{\tau} \rightarrow -\infty$ la solución tienda a la inerte $-(16/\pi^2)\exp(-\pi^2\tilde{\tau}(1 + 1/\ell^2))\sin(\pi x)\sin(\pi y/\ell)$. Para aprovechar la simetría hacemos $(\xi, \eta) = 2(x, y)$, $\hat{\tau} = 4\tilde{\tau}$ y $\hat{D}_a = D_a/4$ de manera que el problema puede formularse como:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \hat{\tau}} = \Delta \psi + \hat{D}_a e^\psi \quad (5.24a)$$

$$\hat{\tau} \ll -1: \quad \psi \rightarrow -\frac{16}{\pi^2} \sin \frac{\pi}{2} \xi \sin \frac{\pi}{2} \frac{\eta}{\ell} e^{-\frac{\pi^2}{4}(1+1/\ell^2)\hat{\tau}} \quad (5.24b)$$

$$\psi(0, \eta, \hat{\tau}) = \psi(\xi, 0, \hat{\tau}) = 0 \quad (5.24c)$$

El procedimiento numérico para resolver este problema se describe en el apéndice A.5.1.

La solución de (5.24) presenta explosión, esto es $\psi \rightarrow \infty$ en algún punto para $\hat{\tau} = \hat{\tau}_{ig}(\hat{D}_a, \ell)$, si el número de Damköhler es mayor que el crítico. En los instantes próximos a $\hat{\tau}_{ig}$, ψ es grande frente a la unidad lo que corresponde al desarrollo de un "hot-spot" en una región muy pequeña situada en torno al punto donde se alcanza el máximo valor de ψ . Dold [DO] ha demostrado que este "hot-spot" posee una estructura asintótica universal que es independiente de las condiciones, tanto físico-químicas como

geométricas, que han producido la ignición. En particular la temperatura máxima es proporcional a $-\ln(\hat{\tau}_{ig} - \hat{\tau})$, de forma que el valor de $\hat{\tau}_{ig}$ puede determinarse a partir de los resultados numéricos imponiendo que ψ_{max} tenga este comportamiento. La figura 5.5 muestra el tiempo de ignición $\tilde{\tau}_{ig} = \hat{\tau}_{ig}/4$ en función D_a para distintos valores de ℓ . Puede apreciarse la existencia del valor crítico de D_a para el cual $\tilde{\tau}_{ig} \rightarrow \infty$, alcanzando (5.24) una solución estacionaria para valores inferiores.

En la figura 5.6 se ha representado la distribución de ψ en el caso $\ell = 1$ para tres valores de D_a de diferente orden de magnitud y cuatro valores de $\hat{\tau}$. A medida que D_a aumenta se produce la transición entre el régimen de autoignición ($D_a = 16$), en el cual la temperatura aumenta en todos los puntos del sólido y la ignición tiene lugar en el centro, y el régimen de ignición ($D_a = 240$), en el que el máximo de temperatura se ha desplazado hacia la esquina mientras que en la zona central la temperatura es aproximadamente la inerte y, debido a que el tiempo de ignición es corto, es mucho menor que la temperatura superficial. El caso intermedio ($D_a = 60$) corresponde a la situación en la cual la onda térmica ha sido capaz, antes de producirse la ignición, de elevar significativamente la temperatura respecto de la inicial en todo el sólido, existiendo una región amplia en la cual $\varphi - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$ y donde tiene lugar la reacción, cuyo efecto se transmite por conducción al resto del sólido si bien el punto de temperatura máxima ya no se encuentra situado en el centro. Este régimen puede considerarse como la frontera entre la autoignición y la ignición. Los resultados numéricos indican que el rango de valores de D_a en que tiene lugar la transición entre ambos regímenes es 40 a 150.

Mediante (5.23) podemos encontrar la relación entre D_a y el tiempo de ignición referido al de conducción tal y como se muestra en la figura 5.7. Se ha representado también el tiempo de ignición, τ_{ig} , que se determina mediante la expresión (5.17) correspondiente a $D_a \gg 1$. El valor de τ_{ig} determinado por (5.17) es inferior al que se obtiene a partir de (5.24) incluso cuando $D_a \sim 150 \gg 1$. El error que introduce (5.17) es del orden del 15% originado principalmente por la omisión de los términos no estacionarios de (5.15) que son importantes cuando $\tau \sim \tau_{ig}$.

5.3 IGNICION EN SOLIDOS CILINDRICOS Y ESFERICOS

5.3.1 Formulación y adimensionalización

Mediante un procedimiento análogo al empleado en el apartado anterior

puede analizarse el proceso de ignición en cuerpos cilíndricos y esféricos. Como antes la adimensionalización conducirá a dos situaciones muy diferentes: $D_a \gg 1$ y $D_a = \mathcal{O}(1)$. Para la primera utilizaremos los resultados del capítulo 2, mientras que la segunda requerirá la integración de la ecuación de la energía con una condición inicial apropiada. Dado que el análisis para los casos cilíndricos y esféricos es muy similar lo desarrollaremos de modo paralelo señalando las diferencias que se encuentran.

La ecuación de conducción del calor en el dominio Ω que representa el interior de un cilindro o esfera de radio a puede escribirse como:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{1}{r^j} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^j \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \rho q B e^{-E/RT} \quad (5.25a)$$

siendo $j = 1$ para el cilindro y $j = 2$ para la esfera. Las condiciones iniciales y de contorno son:

$$t = 0 : \quad T = T_o \quad \text{en} \quad \Omega \quad (5.25b)$$

$$t > 0 : \quad T = T_s \quad \text{en} \quad \partial\Omega \quad (5.25c)$$

La adimensionalización se realiza definiendo los mismos parámetros y variables que en el caso anterior, excepto $\xi = r/a$, obteniendo el problema:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^j} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^j \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right) + \varepsilon D_a \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad (5.26a)$$

$$\tau = 0 : \quad \varphi(\xi, 0) = 0 \quad (5.26b)$$

$$\tau > 0 : \quad \varphi(1, \tau) - 1 = \varphi_\xi(0, \tau) = 0 \quad (5.26c)$$

5.3.2 Solución inerte para el cilindro

La solución inerte correspondiente al caso cilíndrico es solución del problema (5.26) con $D_a = 0$ y está determinada por [CJ, p.328]:

$$\varphi_i = 1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\alpha_n^2 \tau} \frac{J_0(\alpha_n \xi)}{\alpha_n J_1(\alpha_n)} \quad (5.27)$$

siendo J_i la función de Bessel de primera especie de orden i y α_n las raíces de $J_0(\alpha) = 0$. De forma análoga al caso rectangular la serie que interviene en (5.27) es muy

rápidamente convergente si $\tau = \mathcal{O}(1)$. Para $\tau \ll 1$ es más conveniente emplear la siguiente aproximación [CJ, p.330]:

$$\varphi_i = \frac{1}{\sqrt{\xi}} \operatorname{erfc} \left(\frac{1-\xi}{2\sqrt{\tau}} \right) + \frac{(1-\xi)\sqrt{\tau}}{4\epsilon\sqrt{\xi}} \operatorname{ierfc} \left(\frac{1-\xi}{2\sqrt{\tau}} \right) + \dots \quad (5.28)$$

donde $\operatorname{ierfc}(x) = \int_x^\infty \operatorname{erfc}(s) ds$. Para valores de ξ tales que $1-\xi \ll 1$ siempre es posible escribir (5.27) y (5.28) en la forma:

$$\varphi_i = 1 - (1-\xi)B_1(\tau) + o(1-\xi) \quad (5.29)$$

$B_1(\tau)$ se obtiene a partir de (5.27) teniendo en cuenta que:

$$J_o(\alpha_n \xi) = J_o(\alpha_n) + \alpha_n J'_0(\alpha_n)(\xi - 1) + \dots \sim \alpha_n J_1(\alpha_n)(1 - \xi)$$

llegando a:

$$B_1(\tau) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\alpha_n^2 \tau} \quad (5.30)$$

Si $\tau = \mathcal{O}(1)$ esta última puede aproximarse por

$$B_1(\tau) = 2e^{-\alpha_1^2 \tau} \quad (5.31)$$

y si $\tau \ll 1$ y tal que $(1-\xi)/2\sqrt{\tau} \ll 1$, a partir de (5.28) se obtiene:

$$B_1(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} - \frac{1}{2} \quad (5.32)$$

La figura 5.8 muestra la función $B_1(\tau)$ junto con las aproximaciones dadas por (5.31) y (5.32).

5.3.3 Solución inerte para la esfera

La solución de (5.26) con $j = 2$ y $D_a = 0$ es [CJ, p.233]:

$$\varphi_i = 1 + \frac{2}{\pi\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \operatorname{sen} n\pi\xi e^{-n^2\pi^2\tau} \quad (5.33)$$

para $\tau = \mathcal{O}(1)$ y

$$\varphi_i = \frac{1}{\xi} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \operatorname{erfc} \frac{2n+1-\xi}{2\sqrt{\tau}} - \operatorname{erfc} \frac{2n+1+\xi}{2\sqrt{\tau}} \right\} \quad (5.34)$$

para $\tau \ll 1$.

Cuando $1 - \xi \ll 1$ puede escribirse

$$\varphi_i = 1 - (1 - \xi)B_2(\tau) + o(1 - \xi) \quad (5.35)$$

donde

$$B_2(\tau) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \pi^2 \tau} \quad (5.36)$$

que admite las aproximaciones:

$$B_2(\tau) = 2e^{-\pi^2 \tau} \quad (5.37)$$

para $\tau = \mathcal{O}(1)$ y

$$B_2(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\pi \tau}} - 1 \quad (5.38)$$

deducida de (5.34) para $\tau \ll 1$ y tal que $(1 - \xi)/2\sqrt{\tau} \ll 1$.

La función $B_2(\tau)$ y las aproximaciones (5.37) y (5.38) están representadas en la figura 5.9.

5.3.4 Número de Damköhler $D_a \gg 1$

Al igual que ocurría en el caso rectangular la zona de reacción aparece como una capa superficial muy delgada de espesor $1/\sqrt{D_a}$ relativo al radio a . Fuera de esta capa la reacción está congelada y la temperatura está dada por la solución inerte. Empleando como variables $\tilde{\psi} = \varphi - \varphi_i$ el problema (5.26) adopta la siguiente forma:

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^j} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^j \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \xi} \right) + \varepsilon D_a \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\tilde{\psi} - (1 - \varphi_i)}{1 + \alpha(\tilde{\psi} - 1 + \varphi_i)} \right] \quad (5.39a)$$

$$\tilde{\psi}(\xi, 0) = 0 \quad (5.39b)$$

$$\varphi(1, \tau) = \tilde{\psi}_\xi(0, \tau) = 0 \quad (5.39c)$$

En la zona de reacción debe ser $\tilde{\psi}$ y $1 - \varphi_i$ de orden ε lo que teniendo en cuenta (5.25) y (5.29) conduce a las siguientes variables:

$$\psi = \tilde{\psi}/\varepsilon, \quad \eta = (1 - \xi)B_j(\tau)/\varepsilon \quad (5.40)$$

que llevadas a (5.39a) proporcionan

$$\varepsilon^2 \left[\frac{1}{B_j^2} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{1}{B_j^3} \frac{dB_j}{d\tau} \eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right] + \frac{\varepsilon}{B_j} \frac{1}{1 - \eta\varepsilon/B_j} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + \frac{\varepsilon^2 D_a}{B_j^2} \exp(\psi - \eta) \quad (5.41)$$

donde se ha prescindido de los términos de orden ε que aparecen al linealizar el exponente del factor de Arrhenius.

En el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ y con $\varepsilon^2 D_a/B_j^2(\tau) = \mathcal{O}(1)$ la ecuación anterior se reduce

a:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + \frac{\varepsilon^2 D_a}{B_j^2} \exp(\psi - \eta) = 0 \quad (5.42)$$

que debe resolverse con la condición $\psi(0, \tau) = 0$ y la de acoplamiento con la región exterior. A partir de los resultados del capítulo 2 sabemos que este problema admite solución si:

$$\frac{\varepsilon^2 D_a}{B_j^2} < \frac{1 - 2\varepsilon \ln \varepsilon}{2} + \mathcal{O}(\varepsilon)$$

y por tanto la relación que determina el tiempo de ignición es:

$$B_j(\tau_{ig}) = \sqrt{\frac{2\varepsilon^2 D_a}{1 - 2\varepsilon \ln \varepsilon}} \quad (5.43)$$

En el valor crítico para $\varepsilon^2 D_a/B_j^2$ se ha incluido el factor $\varepsilon \ln \varepsilon$ que está asociado a los efectos no estacionarios derivados de la condición de contorno en $\eta = \infty$. Esto supone que en la relación (2.47), deducida de (2.46) bajo la hipótesis de que la curvatura no afecta a la zona de reacción y que determina la corrección δ , se considera sólo el primer término ya que el factor b se determina al resolver la ecuación integral (2.48) para la función A cuya condición de contorno en $y \rightarrow \infty$ depende ahora de la forma de B_j .

Si $\varepsilon^2 D_a \gg 1$ también $B_j^2(\tau_{ig}) \gg 1$ pero esto sólo ocurre si $B_j(\tau) \sim 1/\sqrt{\pi\tau}$ de manera que $\tau \ll 1$ y, por tanto, pueden aplicarse (5.32) y (5.38) pues como $(1 - \xi)B_j = \mathcal{O}(\varepsilon) \ll 1$ es $(1 - \xi)/\sqrt{\pi\tau} \ll 1$. Al llevar (5.32) y (5.38) a (5.43) se encuentra para τ_{ig} :

$$\tau_{ig} = \frac{1}{2\pi\varepsilon^2 D_a} \left(1 - \frac{j}{\sqrt{2\varepsilon^2 D_a}} - 2\varepsilon \ln \varepsilon \right) \ll 1 \quad (5.44)$$

que coincide con el resultado obtenido en (2.53) si se tiene en cuenta que en el cilindro $R = \tilde{\rho}/a = 1$ y para la esfera $1/R = (1/R_1 + 1/R_2) = 2$. Al igual que ocurría en el caso rectangular en este rango de valores de D_a tanto la zona de reacción como la capa de conducción son delgadas pues $D_a \gg 1$ y $\tau_{ig} \ll 1$ comportándose el sólido como si fuese infinito. Si $\varepsilon^2 D_a = \mathcal{O}(1)$ la función $B_j(\tau)$ está determinada por (5.31) ó (5.37) y, si escribimos $B_j = 2e^{-c_j^2 \tau}$ con $c_1 = \alpha_1 \simeq 2.405$ en el caso cilíndrico y $c_2 = \pi$ en el esférico, el tiempo de ignición es

$$\tau_{ig} = \frac{1}{2c_j^2} \ln \left\{ \frac{2(1 - \varepsilon \ln \varepsilon)}{\varepsilon^2 D_a} \right\} = \mathcal{O}(1) \quad (5.45)$$

de forma que el tamaño de la capa de conducción es del mismo orden que el radio del cilindro o esfera. Esta situación, que también se producía en el caso rectangular, ocurre ahora para valores de D_a mayores debido a la ausencia de los efectos geométricos asociados a la esquina y, en general, a las singularidades de la superficie.

La validez de este modelo depende de que, suponiendo que ψ_τ y ψ_η son de orden unidad, los términos situados a la izquierda en (5.41) sean despreciables en el intervalo $[0, \tau_{ig}]$. Estos representan los efectos no estacionarios, ya mencionados en el caso rectangular, más el efecto de la curvatura en la zona de reacción. La ecuación (5.42) constituye un modelo cuasiestacionario y unidimensional en el cual la curvatura únicamente interviene a través de la función $B_j(\tau)$ asociada a la distribución inerte de temperatura. Conviene recordar que en el análisis realizado en el capítulo 2 el parámetro ν asociado a la curvatura era del orden de $1/\varepsilon^2 D_a$. Cuando $\varepsilon^2 D_a \gg 1$ ésta es muy pequeña y entonces $B_j(\tau) \sim 1/\sqrt{\pi\tau}$, que es el factor correspondiente a la distribución inerte unidimensional. A medida que $\varepsilon^2 D_a$ disminuye la curvatura se hace más importante y esto se refleja en la modificación de la expresión para B_j , de forma que si $\varepsilon^2 D_a = \mathcal{O}(1)$ entonces es $B_j \sim 2e^{-c_j^2 \tau}$.

Las condiciones que deben verificarse para que el modelo sea aplicable son:

$$\varepsilon^2/B_j \ll 1 \quad (5.46a)$$

$$\varepsilon^2|B'_j|/B_j^2 \ll 1 \quad (5.46b)$$

$$\varepsilon/B_j \ll 1 \quad (5.46c)$$

Cuando alguna de las relaciones anteriores sea de orden unidad en el intervalo $[0, \tau_{ig}]$ la ecuación (5.43) no es correcta. Para que esto ocurra debe ser $B_j(\tau_{ig}) \ll 1$ de manera que puede utilizarse la aproximación $B_j(\tau) \simeq 2e^{-c_j^2 \tau}$. Al llevar esta relación a (5.46) y comparar los tres términos se encuentra que la condición (5.46b), correspondiente a los efectos no estacionarios en la zona de reacción, es la que determina el fallo del modelo. En términos del tiempo de ignición y del número de Damkhöler ésta puede expresarse mediante:

$$\tau_{ig} \ll \frac{1}{c_j^2} \ln \frac{2}{\varepsilon c_j} \quad (5.47)$$

$$D_a \gg c_j^2/2 \quad (5.48)$$

La relación (5.43) que determina el tiempo de ignición si se cumple (5.47) o (5.48) está representada en la figura 5.10. Respecto de la corrección asociada a los efectos no estacionarios pueden efectuarse consideraciones análogas a las del caso rectangular que por brevedad omitimos.

La validez de este modelo depende de que, suponiendo que ψ_τ y ψ_η son de orden unidad, los términos situados a la izquierda en (5.41) sean despreciables en el intervalo $[0, \tau_{ig}]$. Estos representan los efectos no estacionarios, ya mencionados en el caso rectangular, más el efecto de la curvatura en la zona de reacción. La ecuación (5.42) constituye un modelo cuasiestacionario y unidimensional en el cual la curvatura únicamente interviene a través de la función $B_j(\tau)$ asociada a la distribución inerte de temperatura. Conviene recordar que en el análisis realizado en el capítulo 2 el parámetro ν asociado a la curvatura era del orden de $1/\varepsilon^2 D_a$. Cuando $\varepsilon^2 D_a \gg 1$ ésta es muy pequeña y entonces $B_j(\tau) \sim 1/\sqrt{\pi\tau}$, que es el factor correspondiente a la distribución inerte unidimensional. A medida que $\varepsilon^2 D_a$ disminuye la curvatura se hace más importante y ésto se refleja en la modificación de la expresión para B_j , de forma que si $\varepsilon^2 D_a = \mathcal{O}(1)$ entonces es $B_j \sim 2e^{-c_j^2 \tau}$.

Las condiciones que deben verificarse para que el modelo sea aplicable son:

$$\varepsilon^2/B_j \ll 1 \quad (5.46a)$$

$$\varepsilon^2|B'_j|/B_j^2 \ll 1 \quad (5.46b)$$

$$\varepsilon/B_j \ll 1 \quad (5.46c)$$

Cuando alguna de las relaciones anteriores sea de orden unidad en el intervalo $[0, \tau_{ig}]$ la ecuación (5.43) no es correcta. Para que esto ocurra debe ser $B_j(\tau_{ig}) \ll 1$ de manera que puede utilizarse la aproximación $B_j(\tau) \simeq 2e^{-c_j^2 \tau}$. Al llevar esta relación a (5.46) y comparar los tres términos se encuentra que la condición (5.46b), correspondiente a los efectos no estacionarios en la zona de reacción, es la que determina el fallo del modelo. En términos del tiempo de ignición y del número de Damkhöler ésta puede expresarse mediante:

$$\tau_{ig} \ll \frac{1}{c_j^2} \ln \frac{2}{\varepsilon c_j} \quad (5.47)$$

$$D_a \gg c_j^2/2 \quad (5.48)$$

La relación (5.43) que determina el tiempo de ignición si se cumple (5.47) o (5.48) está representada en la figura 5.10. Respecto de la corrección asociada a los efectos no estacionarios pueden efectuarse consideraciones análogas a las del caso rectangular que por brevedad omitimos.

5.3.5 Número de Damköhler $D_a = \mathcal{O}(1)$

Al igual que en el caso rectangular cuando $D_a = \mathcal{O}(1)$ la zona de reacción es de tamaño comparable al sólido, debido a que los tiempos químico y de conducción son del mismo orden. Hasta que la diferencia $\varphi - 1$ no sea de orden ε la reacción está congelada y la distribución de temperatura es la inerte. El tiempo que transcurre hasta que $\varphi_i - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$, deducido a partir de (5.27) y (5.33), es del orden de τ_ε definido mediante

$$\tau_\varepsilon = \frac{\ln(1/\varepsilon)}{c_j^2} \quad (5.49)$$

Tomando como variables

$$\psi = (\varphi - 1)/\varepsilon, \quad \tilde{\tau} = \tau - \tau_\varepsilon \quad (5.50)$$

el problema (5.26) en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ es:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tilde{\tau}} = \frac{1}{\xi^j} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^j \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) + D_a e^\psi \quad (5.51a)$$

$$\tilde{\tau} \rightarrow -\infty \begin{cases} \psi \rightarrow -\frac{2}{\alpha_1 J_1(\alpha_1)} J_0(\alpha_1, \xi) e^{-\alpha_1^2 \tilde{\tau}} & \text{si } j = 1 \\ \psi \rightarrow -\frac{2 \operatorname{sen} \pi \xi}{\pi \xi} e^{-\pi^2 \tilde{\tau}} & \text{si } j = 2 \end{cases} \quad (5.51b)$$

$$\psi(1, \tilde{\tau}) = \psi_\xi(0, \tilde{\tau}) = 0 \quad (5.51c)$$

habiendo reemplazado la condición inicial (5.26b) por la que expresa el hecho de que cuando la reacción está congelada la temperatura es la inerte.

El procedimiento numérico para resolver (5.51) está descrito, al igual que en el caso rectangular, en el apéndice A.5.1.

Los valores de $\tilde{\tau}_{ig}$ en función de D_a que se obtienen a partir de los resultados numéricos de la integración de (5.51) y con el mismo criterio que en el caso rectangular, están representados en la figura 5.11. Para un mismo número de Damköhler el tiempo de ignición del cilindro es mayor que el de la esfera como consecuencia del mayor efecto de concentración de calor que presenta ésta.

En las figuras 5.12 y 5.13 se han representado los perfiles de temperatura correspondientes a los instantes próximos a la ignición para distintos valores de D_a , que

caracterizan los regímenes de autoignición, ignición y transición entre ambos. El rango asociado a la transición es prácticamente el mismo que en el caso anterior: 11-40 para el cilindro y 14-45 para la esfera (téngase en cuenta que el número de Damköhler en el cilindro y en la esfera está basado en el radio mientras que en el rectángulo lo está en el lado).

Por último en las figuras 5.14 y 5.15 se comparan los resultados obtenidos mediante la teoría cuasiestacionaria (5.43) y mediante la integración numérica de (5.51). De nuevo el tiempo de ignición calculado a partir de (5.43) es menor aunque ahora el error introducido es ligeramente mayor, en torno al 20% .

5.4 RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El análisis de la ignición de sólidos finitos puede realizarse mediante técnicas asintóticas según dos métodos diferentes dependiendo del valor del número de Damköhler.

Cuando $D_a \gg 1$ la reacción se produce en una capa superficial muy delgada de manera que son aplicables los resultados obtenidos al analizar la estructura de la zona de reacción en sólidos infinitos. Los efectos asociados al tamaño finito del sólido se reflejan en las distribuciones inertes de temperatura, a través de las funciones $A(\tau, \ell)$ y $B_j(\tau)$, que intervienen en la definición de las variables de la zona de reacción (5.14) y (5.40) y, por tanto, en las relaciones que determinan el tiempo de ignición (5.18) y (5.43). Si εD_a en el caso rectangular ó $\varepsilon^2 D_a$ en el cilíndrico/esférico son grandes frente a la unidad el tiempo de ignición es pequeño, siendo las funciones $A(\tau, \ell)$ y $B_j(\tau)$ las que corresponden a la solución inerte cuando el sólido es infinito. Esto es consecuencia de que durante el breve intervalo de tiempo que transcurre hasta producirse la ignición la capa calentada por conducción es delgada y el sólido aparece como infinito. En este caso pueden aplicarse directamente los resultados obtenidos en el caso de sólidos infinitos. Cuando εD_a ó $\varepsilon^2 D_a$ son de orden unidad los tiempos de ignición son también de orden unidad. Esto significa que la capa de conducción es de tamaño comparable al sólido y por tanto la distribución de temperatura inerte debe ser la correspondiente a un sólido finito, lo que cambia el orden de magnitud y la expresión de las funciones $A(\tau, \ell)$ y $B_j(\tau)$. El distinto orden de magnitud del número de Damköhler en este límite distinguido, $D_a = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$ en el caso rectangular y $D_a = \mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$ en el cilíndrico/esférico, es consecuencia del efecto geométrico asociado a la presencia de las esquinas que reduce el tiempo de ignición en un factor de ε . Este modelo cuasiestacionario deja de ser válido cuando

alguno de los términos asociados a los efectos no estacionarios no puede despreciarse en las ecuaciones (5.15) y (5.40). Analizando sus magnitudes relativas puede determinarse la región de validez en términos del tiempo de ignición y el número de Damköhler.

En el caso $D_a = \mathcal{O}(1)$ no es posible efectuar la hipótesis cuasiestacionaria siendo necesario efectuar la integración del problema parabólico. El empleo de técnicas asintóticas permite identificar dos etapas bien definidas en el curso del proceso. La etapa inicial, que podemos denominar inerte, corresponde a un calentamiento previo a la activación de la reacción química. Durante esta etapa, cuya duración en la escala del tiempo de conducción es de orden $\ln(1/\varepsilon)$, la temperatura está determinada basicamente por la distribución inerte. Cuando la diferencia $\varphi_i - 1$ es de orden ε comienza la etapa de transición en la cual debe retenerse el término de reacción. En los problemas resultantes (5.24) y (5.51) interviene un único parámetro, el número de Damköhler, ya que la división del proceso en dos etapas permite eliminar la dependencia, a través de ε , de la energía de activación. En consecuencia el tiempo de ignición puede expresarse como suma de los tiempos asociados a cada una de ellas. El primero, τ_ε , representa el tiempo necesario para que la temperatura en el interior del sólido, por efecto de la temperatura superficial, aumente hasta valores cuya diferencia con ésta sea de orden ε y depende, por tanto, de este parámetro y de factores geométricos según las relaciones (5.22) y (5.49). El tiempo correspondiente a la etapa de transición, $\hat{\tau}_{ig}$, se obtiene a partir de la integración numérica y depende solamente del número de Damköhler. Mientras en el caso $D_a \gg 1$ el criterio para definir el tiempo de ignición es la presencia de una singularidad matemática en la solución, cuando $D_a = \mathcal{O}(1)$ el criterio consiste en el acoplamiento con la estructura asintótica del "hot-spot" que comienza a desarrollarse.

La comparación de los resultados obtenidos en ambos límites, $D_a \gg 1$ y $D_a = \mathcal{O}(1)$, en la región de validez común no es excesivamente satisfactoria pues los errores introducidos no son pequeños. Esto puede atribuirse a dos tipos de causas. Una de ellas, y quizás la más importante, es la no inclusión de la corrección por efectos no estacionarios en el caso $D_a \gg 1$. Esta aumentaría el tiempo de ignición cuasiestacionario acercando las curvas de las figuras 5.7, 5.14 y 5.15. Otra fuente de error puede encontrarse en el procedimiento de integración de las ecuaciones parabólicas que ha sido realizado sin grandes refinamientos con el único ánimo de ilustrar los resultados de la teoría. Para la obtención de resultados precisos hubiera sido necesario, dada la naturaleza de las ecuaciones, el empleo de un integrador "stiff" como en [KP1] o [PHK].

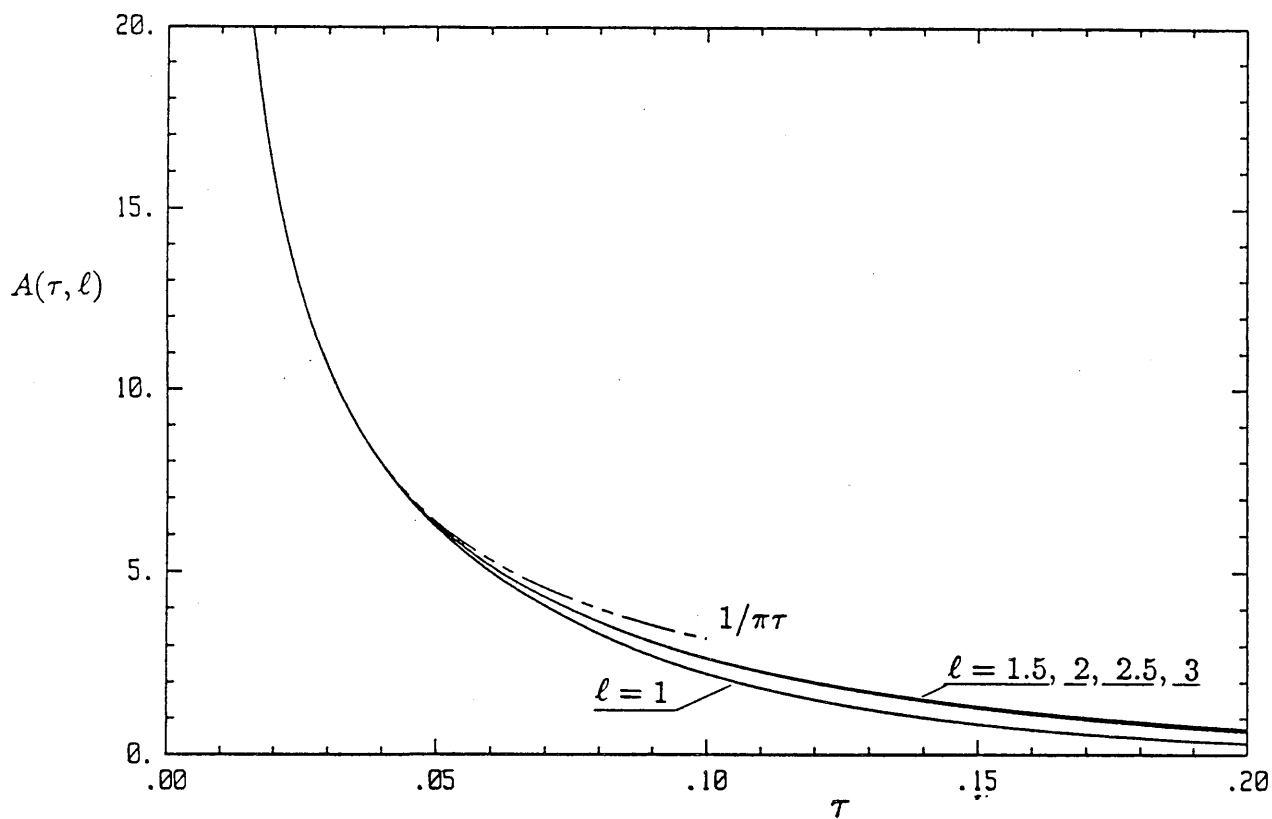


Figura 5.1 Gráfica de la función $A(\tau, \ell)$ y de su aproximación para $\tau \ll 1$.

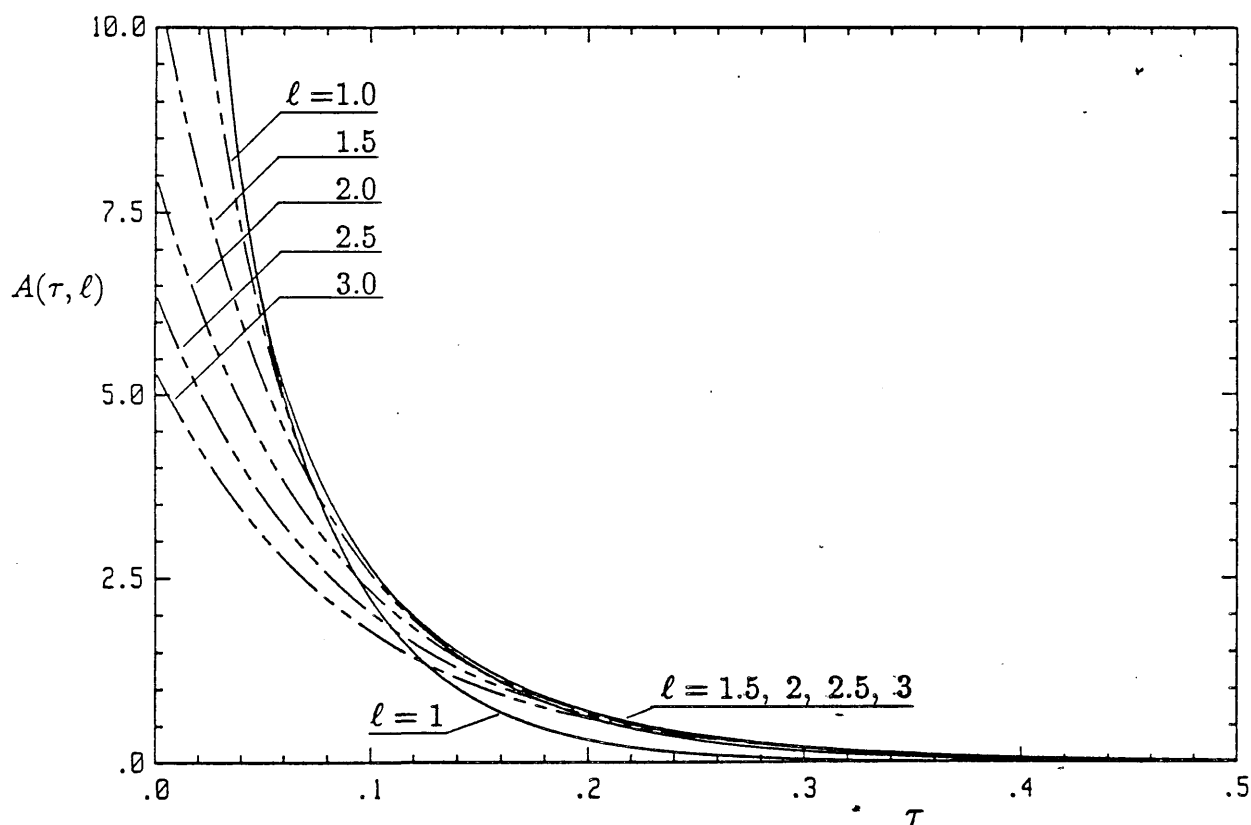


Figura 5.2 Gráfica de la función $A(\tau, \ell)$ y de su aproximación para $\tau = \mathcal{O}(1)$.

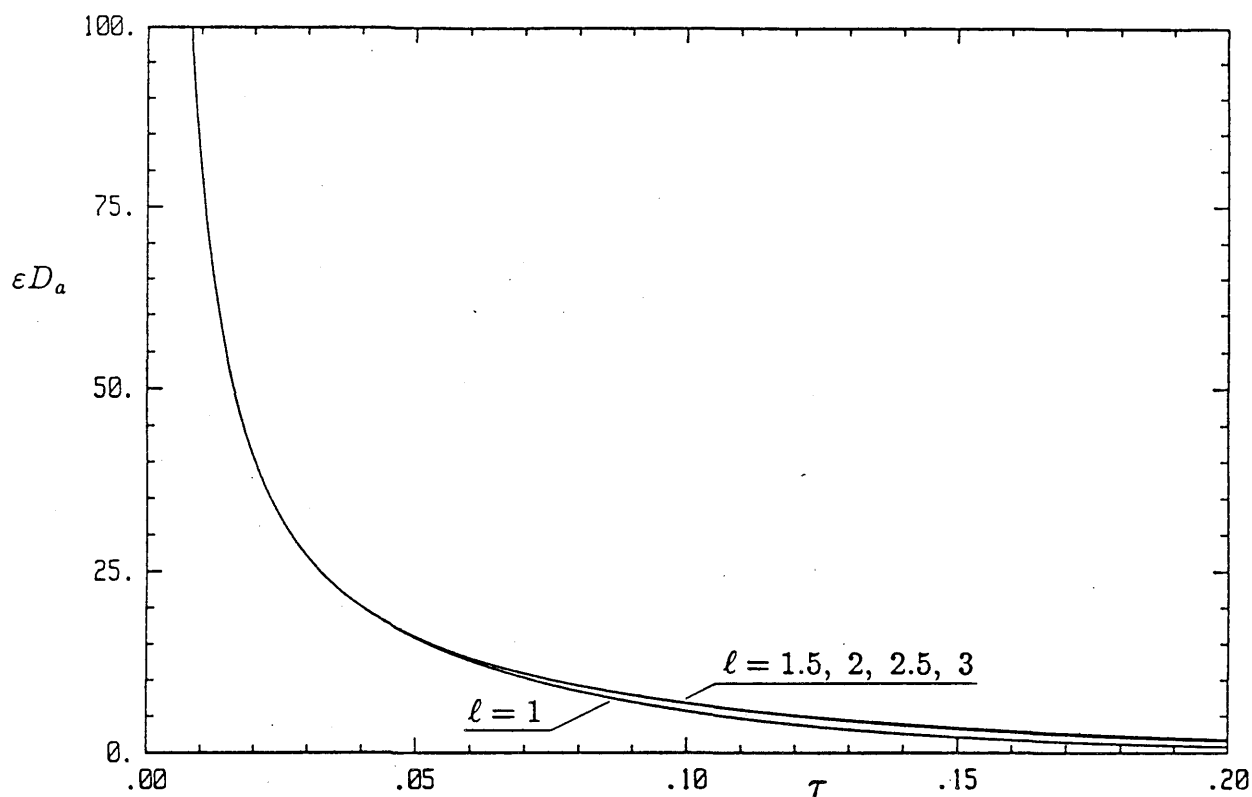


Figura 5.3.a Gráfica de $\varepsilon D_a = 2.547A(\tau, \ell)$ para determinar el tiempo de ignición en un rectángulo cuya esbeltez es ℓ .

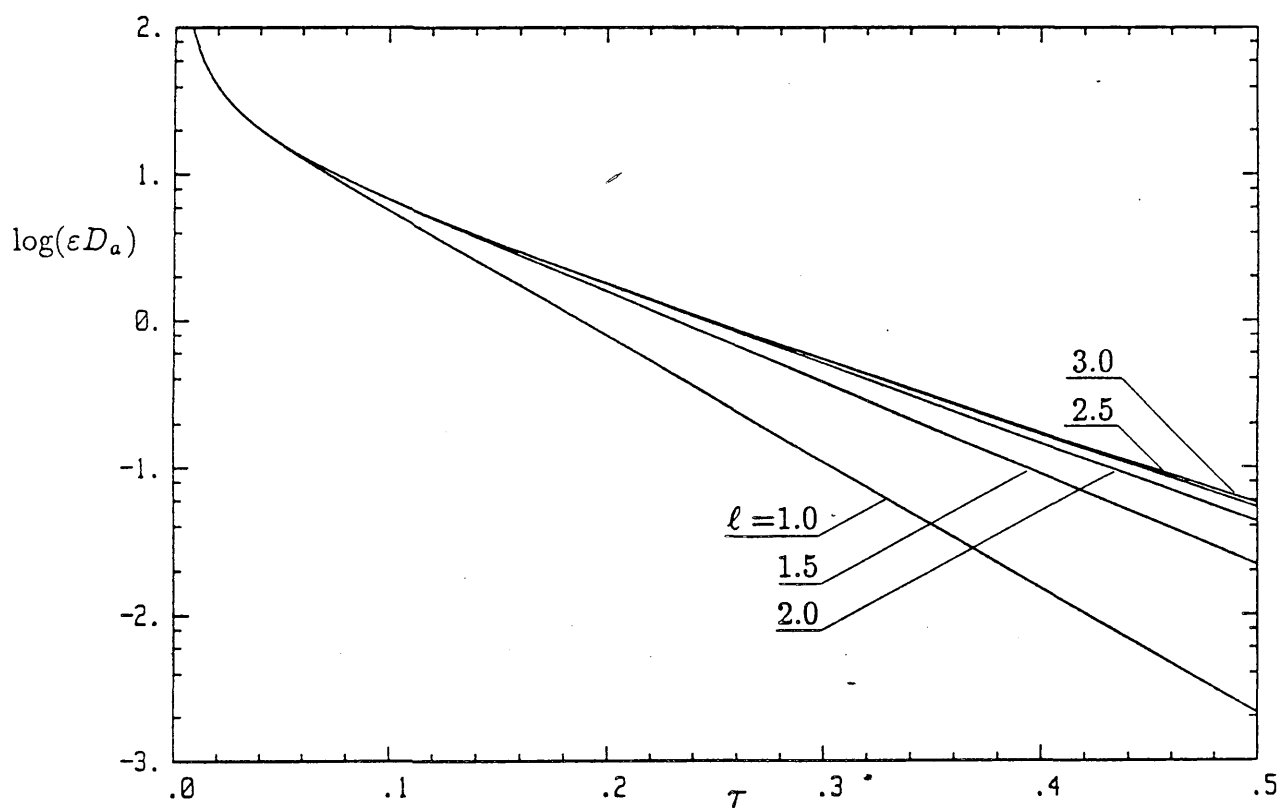


Figura 5.3.b Gráfica de $\log(\varepsilon D_a)$

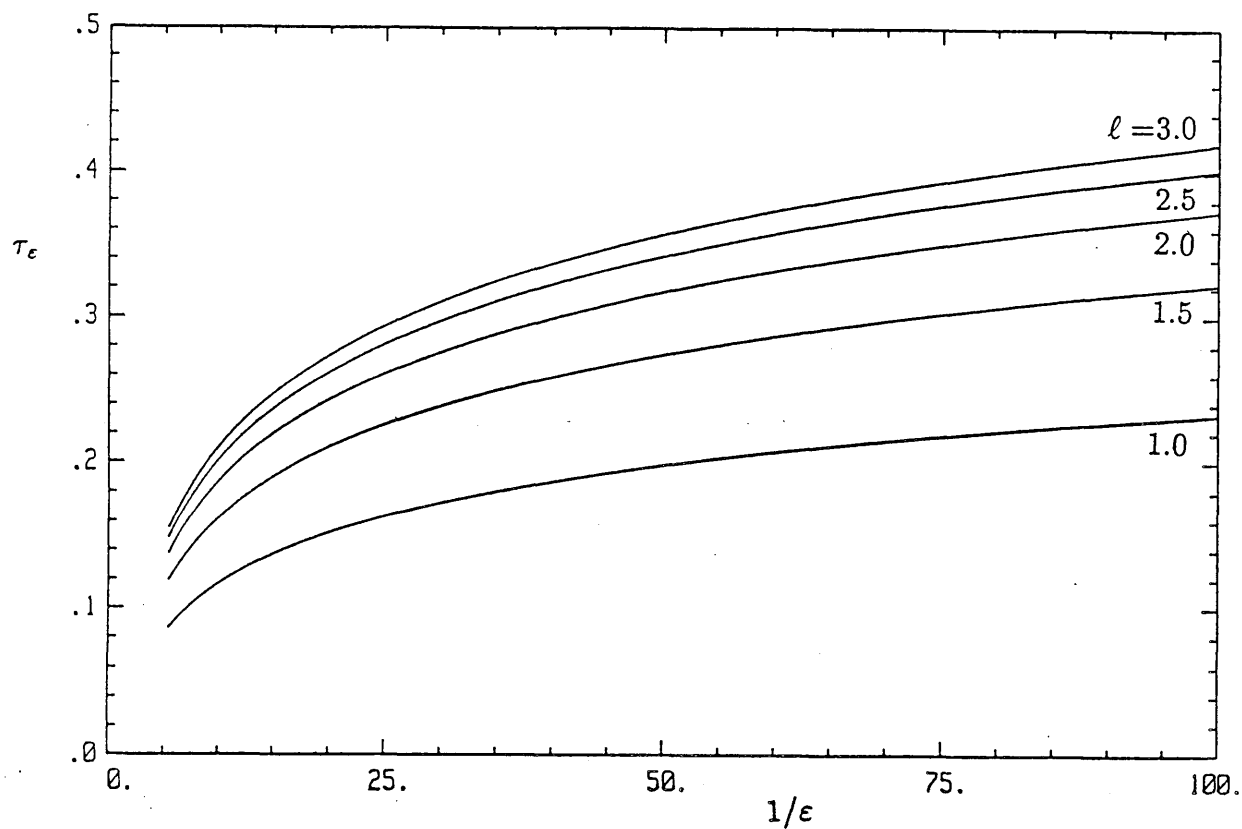


Figura 5.4 Tiempo de calentamiento inerte, τ_ϵ , correspondiente al rectángulo de esbletez ℓ .

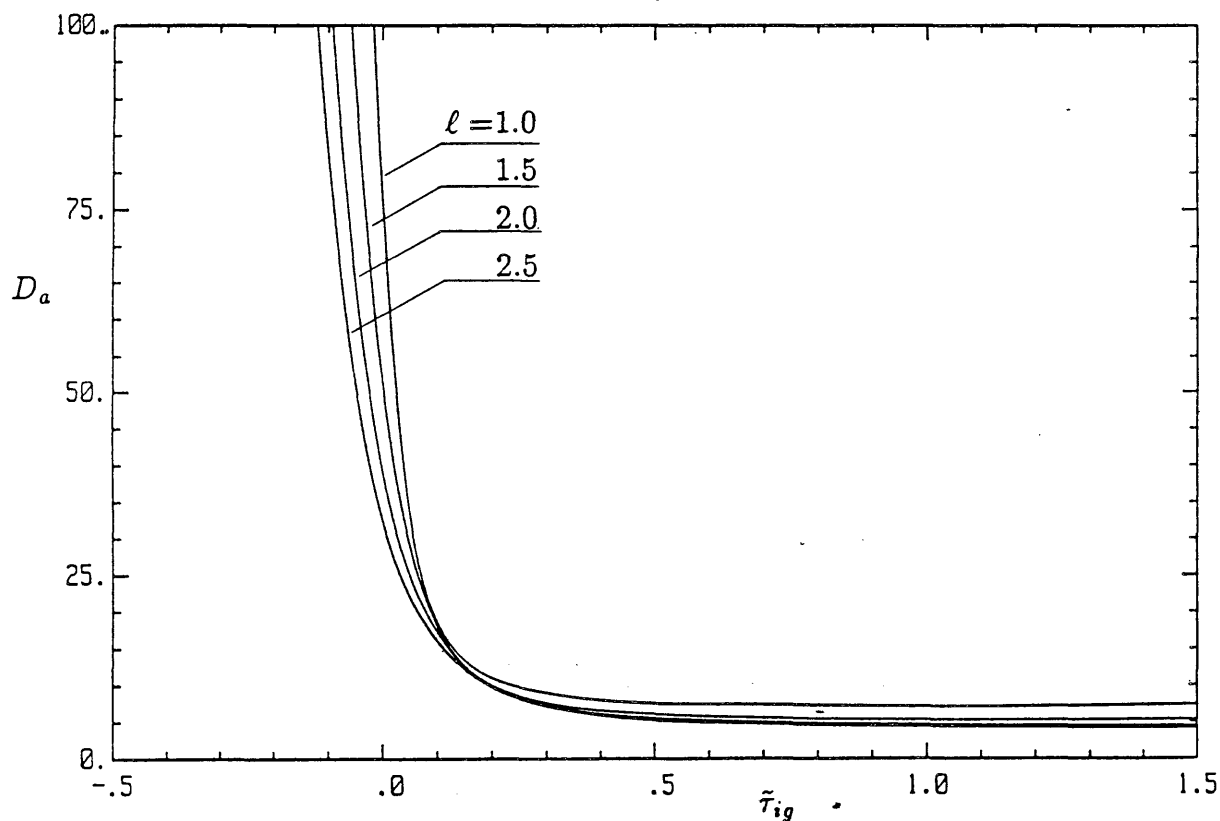


Figura 5.5 Tiempo de ignición, $\tilde{\tau}_{ig}(D_a, \ell)$, asociado a la etapa de transición.

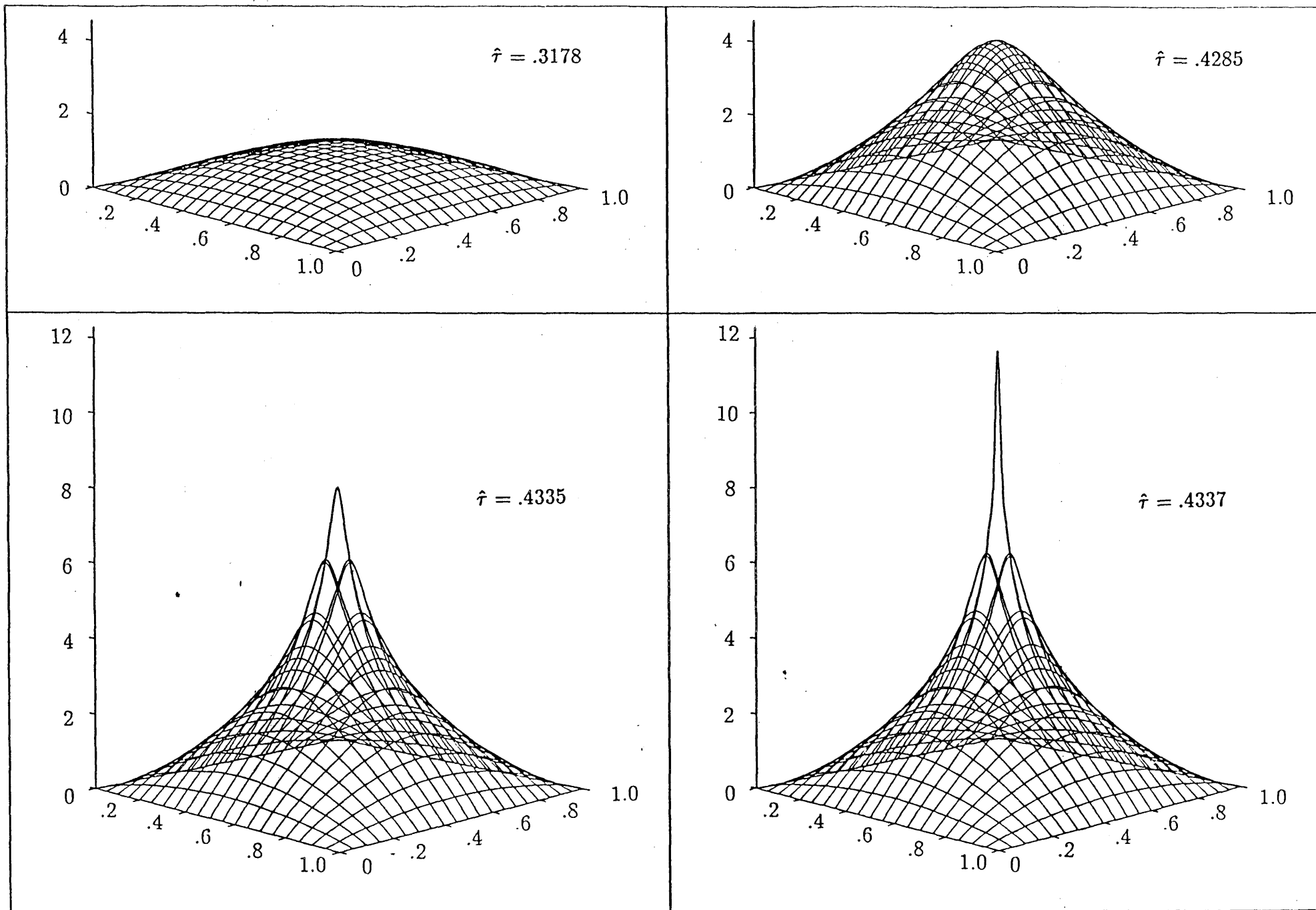


Figura 5.6.a Distribución de temperatura en los instantes próximos a la ignición para $D_a = 16$.

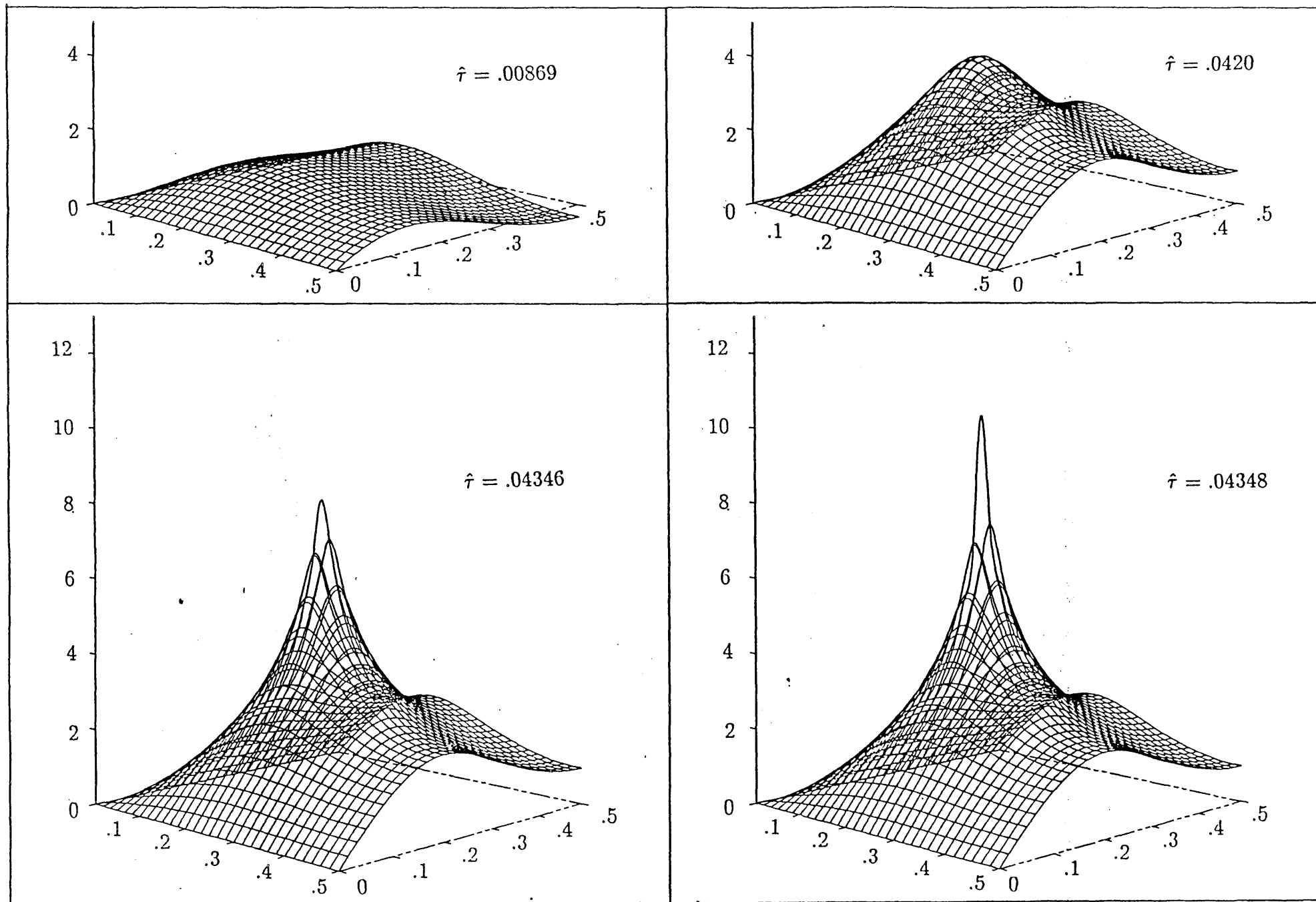


Figura 5.6.b Distribución de temperatura en los instantes próximos a la ignición para $D_a = 60$.

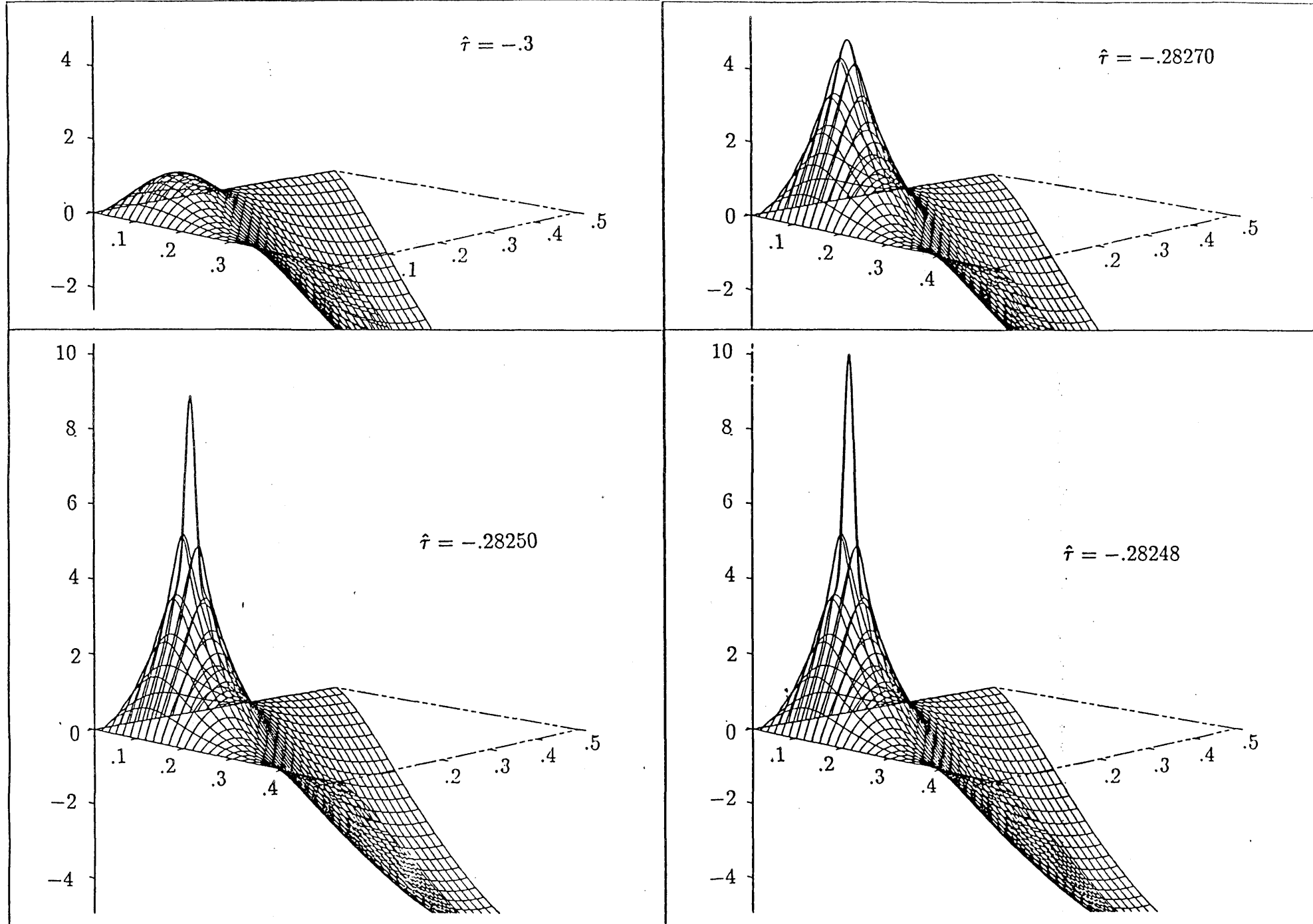


Figura 5.6.c Distribución de temperatura en los instantes próximos a la ignición para $D_a = 240$.

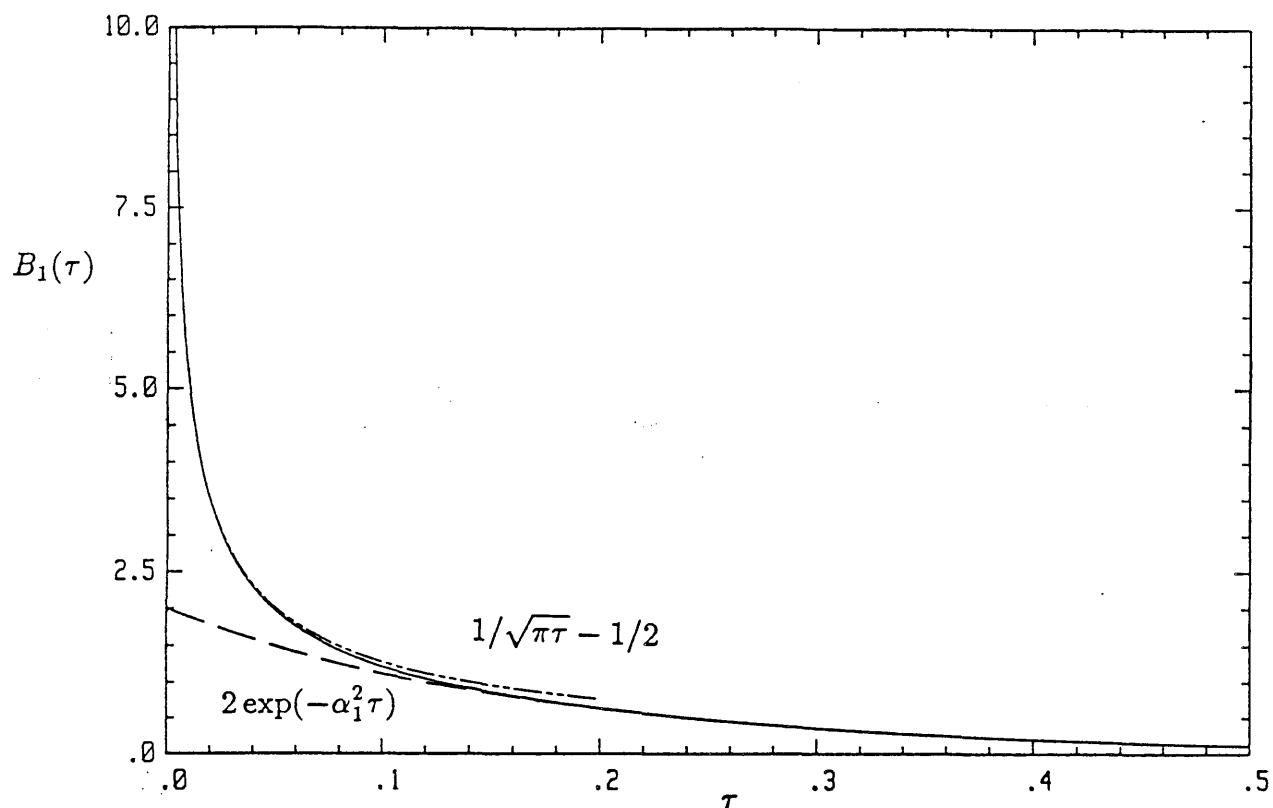


Figura 5.8 Gráfica de la función $B_1(\tau)$ y de sus aproximaciones para $\tau \ll 1$ y $\tau = \mathcal{O}(1)$.

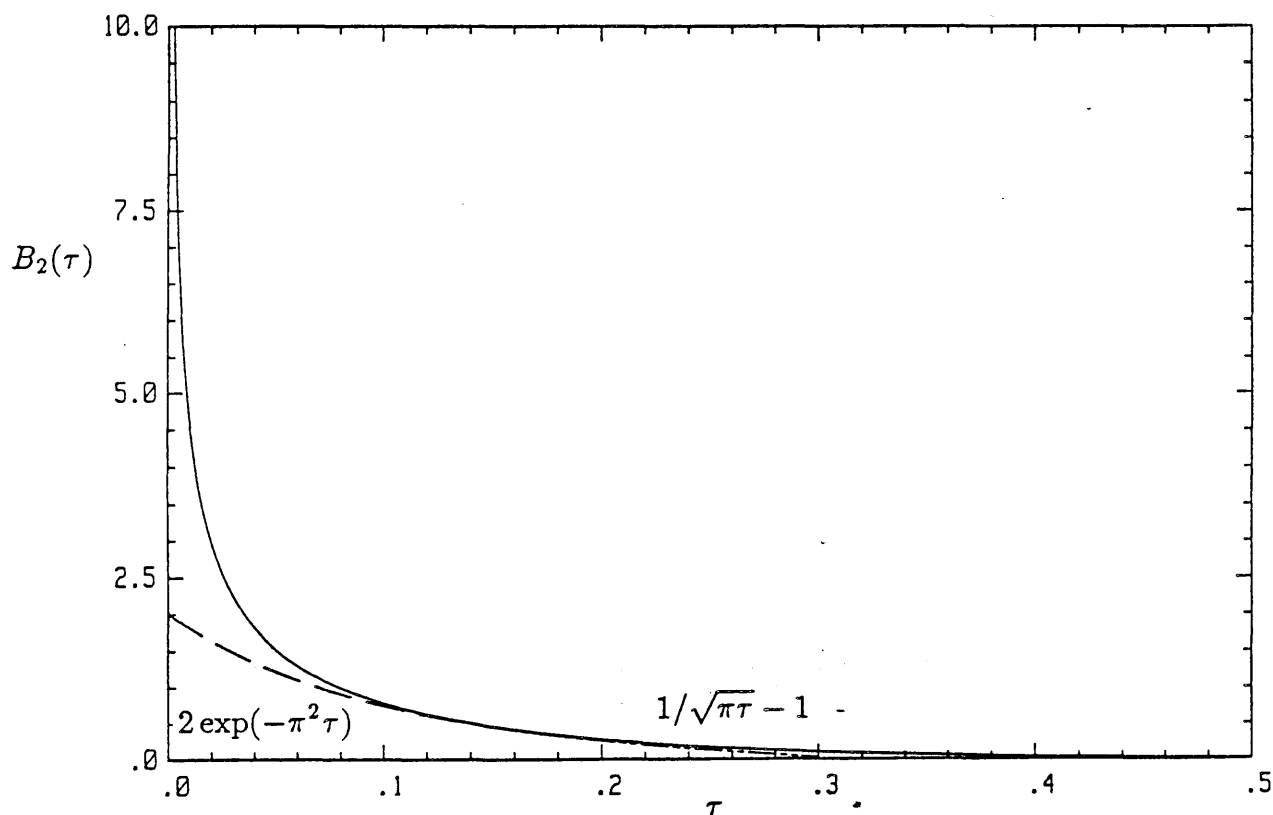


Figura 5.9 Gráfica de la función $B_2(\tau)$ y de sus aproximaciones para $\tau \ll 1$ y $\tau = \mathcal{O}(1)$.

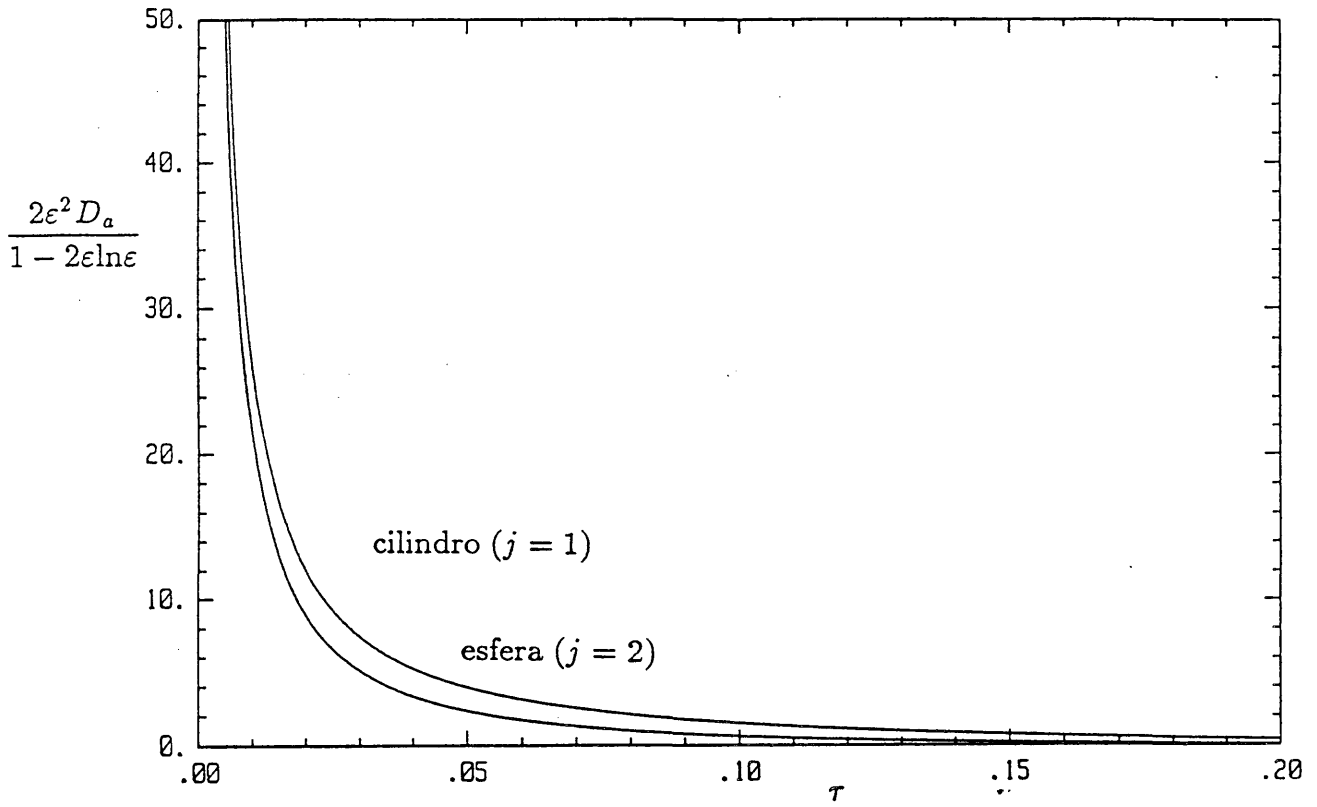


Figura 5.10.a Gráfica de la función $B_j^2(\tau) = 2\varepsilon^2 D_a / (1 - 2\varepsilon \ln \varepsilon)$.

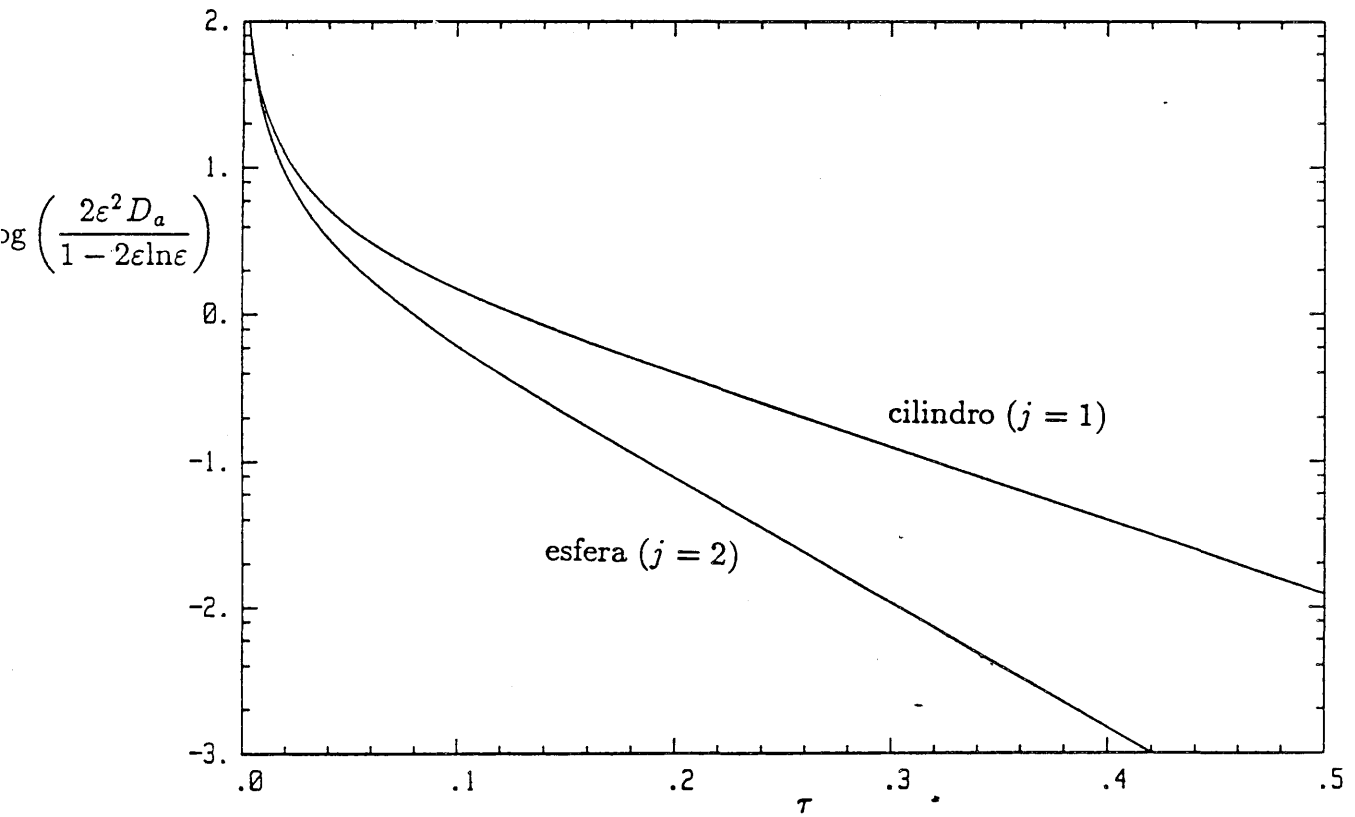


Figura 5.10.b Gráfica de $\log (2\varepsilon^2 D_a / (1 - 2\varepsilon \ln \varepsilon))$.

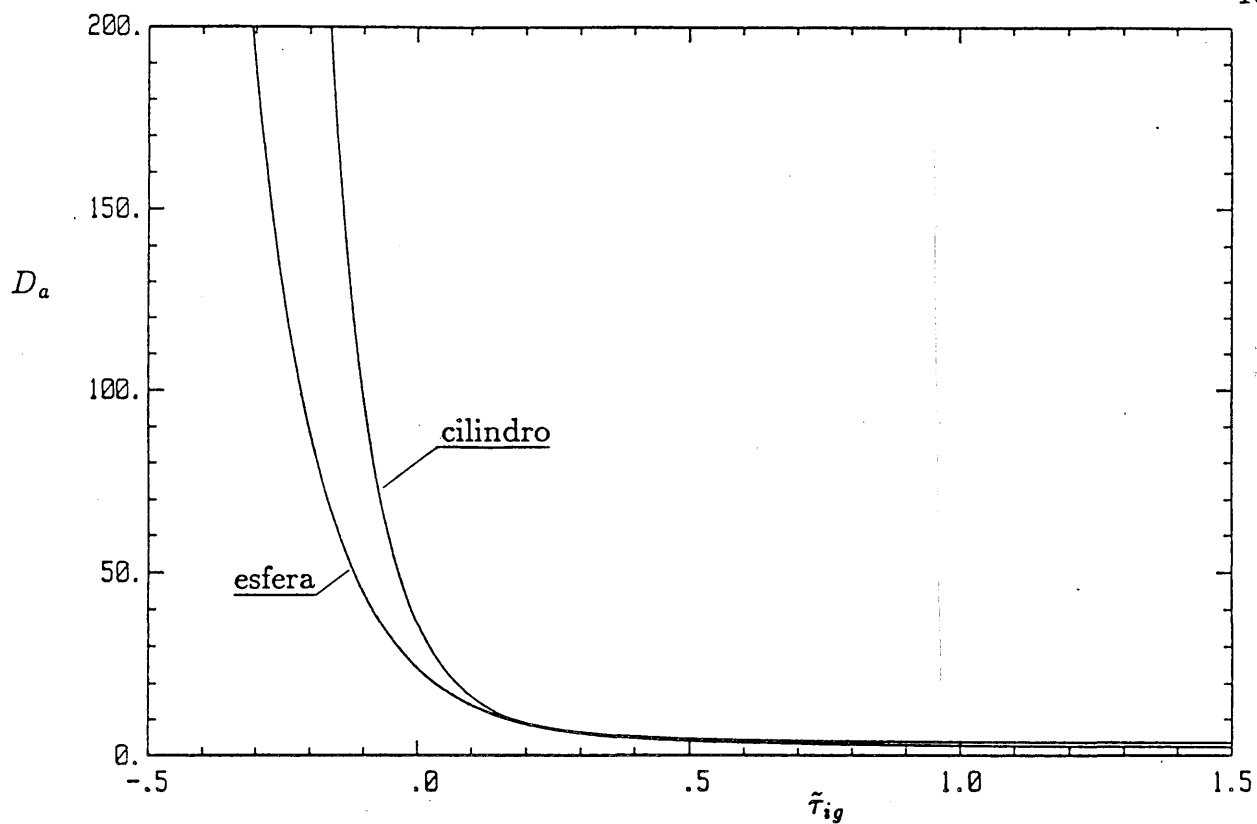


Figura 5.11 Tiempo de ignición, $\tilde{\tau}_{ig}$, asociado a la etapa de transición en los casos cilíndrico y esférico.

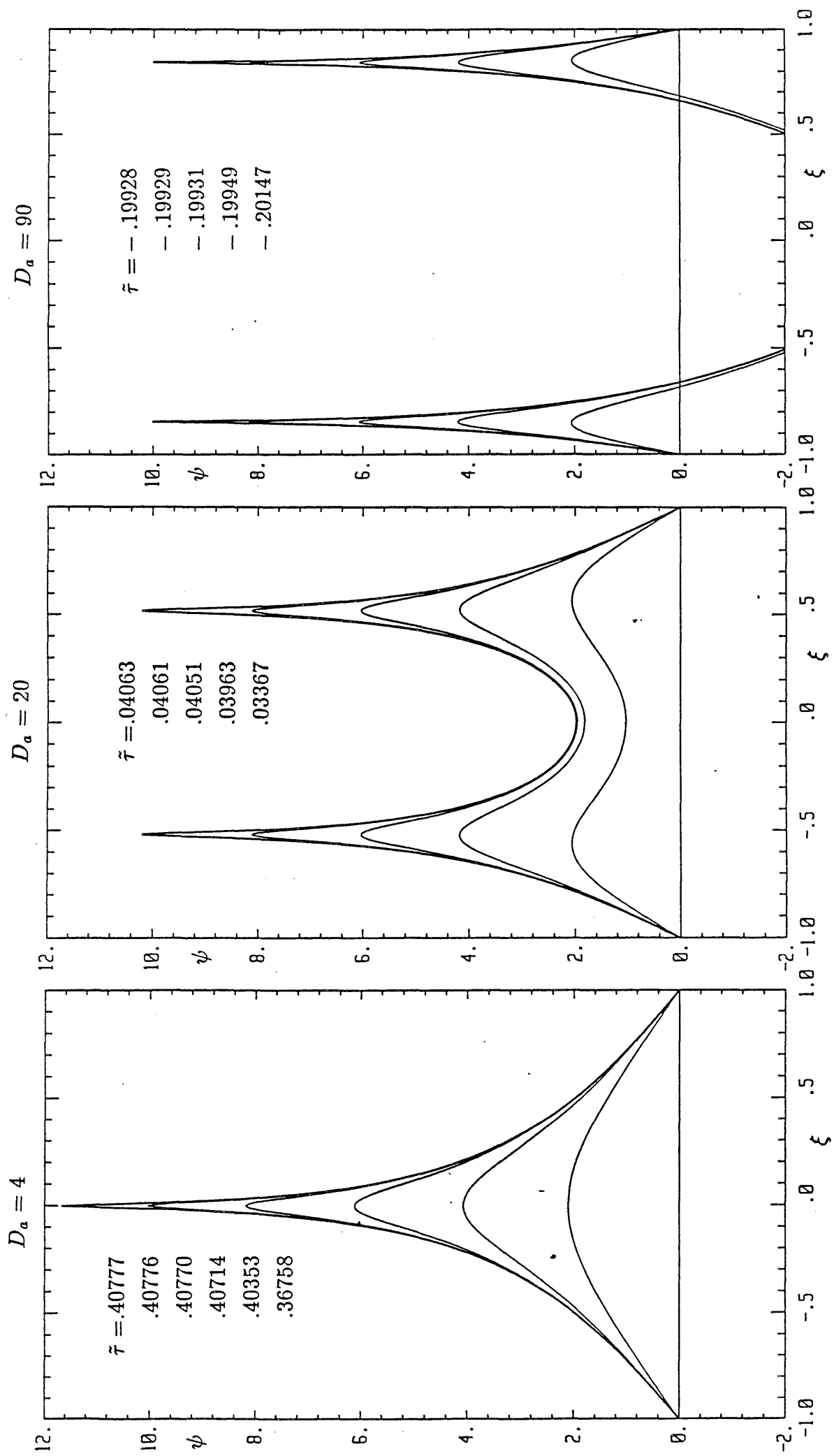


Figura 5.12 Perfiles de temperatura en los instantes próximos a la ignición (cilindro).

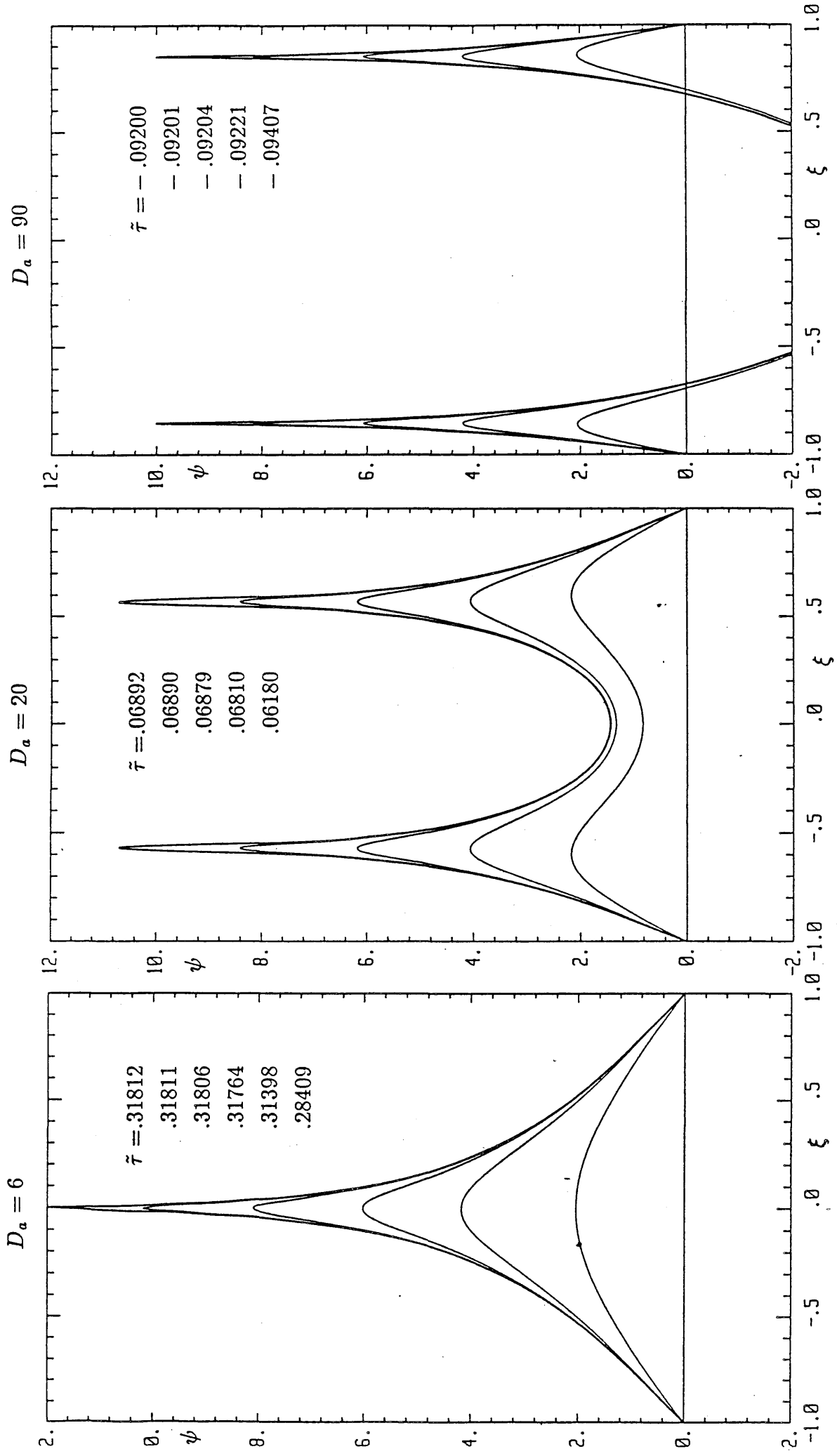


Figura 5.13 Perfiles de temperatura en los instantes próximos a la ignición (esfera).

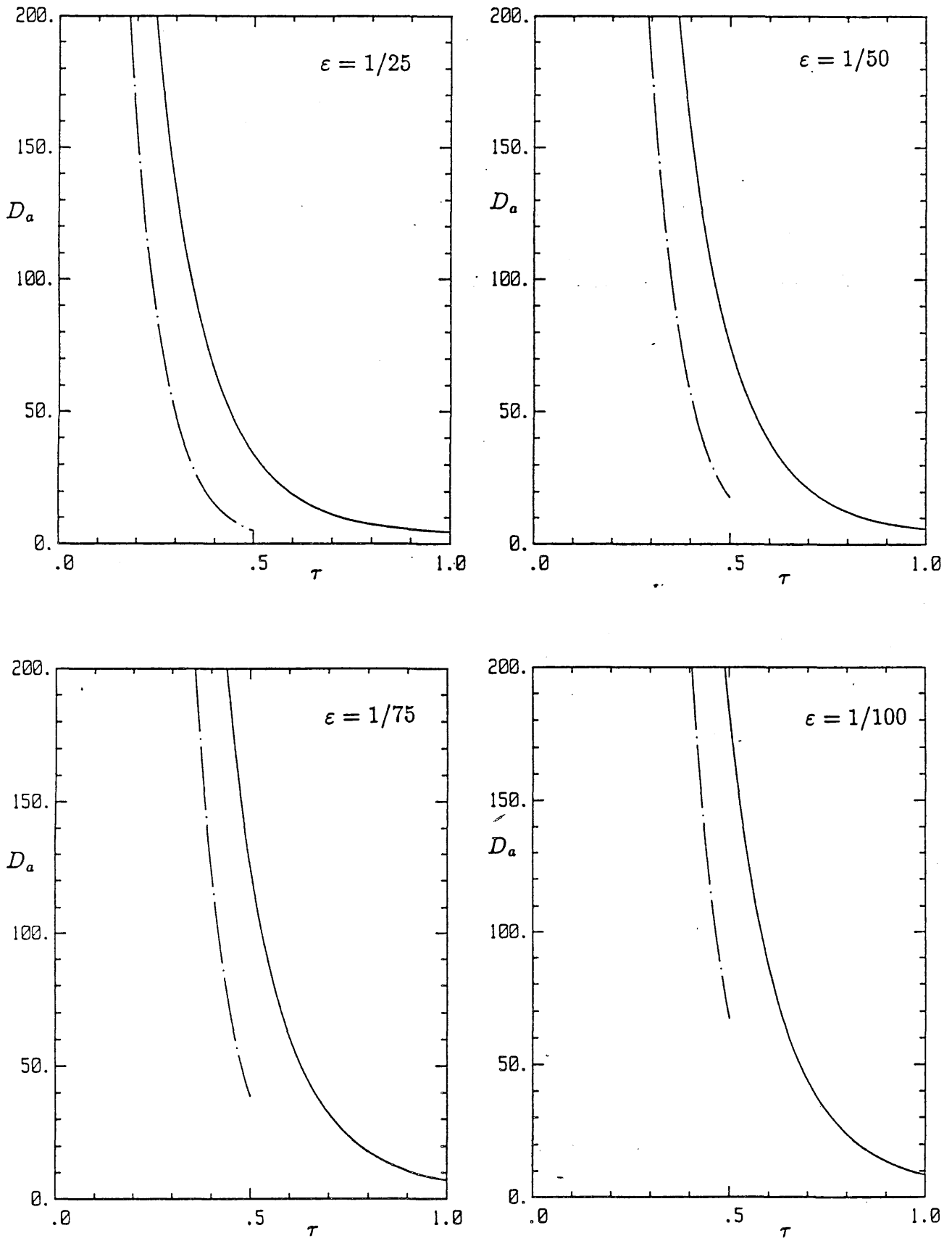


Figura 5.14 Caso cilíndrico: comparación entre los resultados obtenidos mediante la teoría cuasiestacionaria y la integración numérica de la ecuación parabólica.

teoría cuasiestacionaria — — — — —

solución numérica —————

APENDICE 5.1

ESQUEMA NUMERICO PARA LOS PROBLEMAS (5.24) Y (5.52)

A continuación describimos brevemente el esquema utilizado para la solución numérica del problema (5.24).

Mediante el método de Newton-Kantorovich buscamos la solución del problema como límite de la sucesión de problemas lineales:

$$\mathbf{L}_\nu[v] = -\mathbf{G}[u^\nu]$$

donde

$$v = u^{\nu+1} - u^\nu$$

$$\mathbf{L}_\nu[v] = \frac{\partial v}{\partial t} - \Delta v - v \lambda e^{u^\nu}$$

$$\mathbf{G}[u^\nu] = \frac{\partial u^\nu}{\partial t} - \Delta u^\nu - \lambda e^{u^\nu}$$

Una vez definida una malla en $[0, 1] \times [0, 1]$, que por simplicidad hemos tomado de espaciado uniforme e igual a h , la parte parabólica de los operadores \mathbf{L}_ν y \mathbf{G} se discretiza empleando la aproximación de Crank-Nicholson [LP, p.242] [FL1, p.228]:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} - \Delta f \right)_{x_i, y_j}^{t_m} \simeq \frac{f_{i,j}^m - f_{i,j}^{m-1}}{k} - \frac{1}{2} ((\delta_x^2 + \delta_y^2) (f_{i,j}^m - f_{i,j}^{m-1}))$$

donde k es el incremento temporal ($k = t_m - t_{m-1}$) y δ^2 representa el operador usual de diferencias centradas para la derivada segunda. El término no lineal e^f se discretiza mediante:

$$e^f \simeq \frac{1}{2} (\exp(f_{i,j}^m) + \exp(f_{i,j}^{m-1}))$$

ó

$$e^f \simeq \exp\left(\frac{1}{2} (f_{i,j}^m + f_{i,j}^{m-1})\right)$$

pues ambos difieren en términos de orden k^2 , de manera que el error de truncación es siempre de orden k^2 .

Introduciendo las condiciones de contorno en la forma usual se genera un sistema de ecuaciones que puede escribirse como:

$$[\rho[\mathbf{B}] + \text{diag}\{1 - k F_{i,j}^\nu\}] V = R^\nu$$

donde $\rho = k/2h^2$, \mathbf{B} es la matriz asociada a la discretización del operador de Laplace con las condiciones de contorno (5.24c), $F_{i,j}^\nu$ es el término que proviene de discretizar λe^{u^ν} en el nodo (i, j) , V es el vector de incógnitas y R^ν es el residuo del sistema definido por:

$$R^\nu = -\{\rho[\mathbf{B}]\{U_m^\nu + U_{m-1}\} + \{U_m^\nu\} - \{U_{m-1}\} - k\{F\}\}$$

donde U_{m-1} es el vector solución correspondiente a t_{m-1} y U_m^ν es la iteración de lugar ν del vector solución en t_m . El sistema de ecuaciones, tridiagonal por bloques, se resuelve mediante LSOR por filas y columnas como anteriormente.

El método empleado para el problema (5.52) es análogo. Las únicas diferencias radican en la aproximación de Crank-Nicholson que en este caso es:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{j}{\xi_{j-1}} - \frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2}\right)_{\xi_i}^{t_m} \simeq \frac{f_i^m - f_i^{m-1}}{k} - \frac{1}{2} \left(\left(\delta_\xi^2 + \frac{j}{\xi_i^{j-1}} \delta_\xi \right) (f_i^m - f_i^{m-1}) \right)$$

y en que el sistema de ecuaciones es tridiagonal y puede resolverse directamente mediante el algoritmo de Thomas.

El paso temporal se elige de manera que se reduzca al aumentar la derivada temporal de u según $k_m \sim 1/\max(\partial u/\partial y)^{m-1}$.

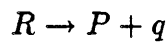
CAPITULO 6

EFFECTO DEL CONSUMO DE REACTANTE EN LA IGNICION DE SOLIDOS

6.1 INTRODUCCION

En los análisis del proceso de ignición realizados hasta este momento no se ha tenido en cuenta el efecto del consumo de reactante bajo la hipótesis de que el calor de reacción, es decir, la cantidad de energía liberada por unidad de masa, es muy grande, de hecho los modelos considerados en los capítulos precedentes se obtienen en el límite formal en que el calor de reacción es infinito.

Si consideramos una reacción química unimolecular de primer orden del tipo



donde R representa la unidad de masa de reactantes, P la de productos y q el calor liberado por unidad de masa. Si designamos por X e Y las fracciones másicas de productos y reactantes las ecuaciones de conservación para estas especies, deducidas de las ecuaciones básicas [WI, p.2], son:

$$\rho \frac{\partial X}{\partial t} = \rho Y B e^{-E/RT} \quad (6.1a)$$

$$\rho \frac{\partial Y}{\partial t} = -\rho Y B e^{-E/RT} \quad (6.1b)$$

debiendo verificar las siguientes condiciones iniciales

$$X(\bar{r}, t = 0) = 0; \quad Y(\bar{r}, t = 0) = 1 \quad (6.1c)$$

En estas ecuaciones se han omitido los términos convectivos y difusivos bajo la hipótesis de que la reacción tiene lugar siempre en fase condensada, ya que en el caso que estamos considerando la difusividad másica es despreciable frente a la térmica. Sumando ambas

ecuaciones se obtiene una primera integral, $X + Y = 1$, de manera que basta resolver una de las ecuaciones (6.1) para inmediatamente determinar la fracción másica de la otra especie. En lo que sigue consideraremos únicamente la evolución del reactante. La ecuación de conservación de la energía debe modificarse para incluir en el término de reacción la fracción másica del reactante, que ya no se considera constante e igual a la unidad, y puede escribirse como:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + \rho q Y B e^{-E/RT}$$

Esta ecuación debe completarse con las condiciones de contorno e iniciales apropiadas que posteriormente especificaremos.

El parámetro que mide la importancia del consumo de reactante en la ignición de sólidos cuya temperatura superficial, T_s , es próxima a la crítica puede obtenerse mediante estimaciones de órdenes de magnitud de los términos que intervienen en las ecuaciones de conservación de la energía y de la fracción másica del reactante. Durante el período de ignición, al que corresponden incrementos de temperatura del orden de la de Frank-Kamenetskii RT_s^2/E , se cumplen las siguientes relaciones que representan el balance de los términos de la ecuación de la energía:

$$\rho c_p \frac{RT_s^2/E}{t_{ig}} \sim \lambda \frac{RT_s^2/E}{\ell^2} \sim \rho q B e^{-E/RT_s}$$

de donde se obtienen

$$D_a = \frac{\ell^2 \rho q B E e^{-E/RT_s}}{\lambda R T_s^2} \sim 1$$

$$t_{ig} \sim \frac{c_p R T_s^2}{q B E e^{-E/RT_s}} = t_q$$

es decir, el número de Damköhler es próximo al crítico y de orden unidad y el tiempo de ignición es del orden del tiempo químico. En el instante de ignición el consumo de reactante δY , es decir la variación de Y en la zona de reacción, verifica

$$\rho \frac{\delta Y}{t_{ig}} \sim \rho B e^{-E/RT_s}$$

con lo que

$$\delta Y \sim \frac{R T_s}{E} \frac{c_p T_s}{q} = \Gamma_c \quad (6.2)$$

Si Γ_c es despreciable frente a la unidad (el calor de reacción es muy grande frente a la entalpía correspondiente a la temperatura de Frank-Kamenetskii) el consumo de

reactante no afecta significativamente a la ignición. En cambio si Γ_c es de orden unidad este efecto es importante y desaparece la criticalidad, pues el combustible se agota antes de que se hayan generado incrementos de temperatura mayores que RT_s^2/E .

Cuando el número de Damköhler es grande la zona de reacción es delgada y los efectos no estacionarios en la misma son despreciables. En este caso los parámetros asociados al consumo de reactante se obtienen también a partir del balance entre los términos de la ecuación de conservación correspondiente, pero con los órdenes de magnitud del tiempo de ignición que se deducen del acoplamiento entre la capa de conducción y la zona de reacción cuando se ignora el efecto del consumo de reactante y que están dados por (1.43) y (1.45), es decir, $t_{ig} \sim t_q/\varepsilon$ en el caso plano y $t_{ig} \sim t_q/\varepsilon^2$ cuando consideramos la esquina. De esta forma en el caso plano se obtiene

$$\delta Y \sim \frac{\Gamma_c}{\varepsilon^2} = \frac{c_p T_s}{q} \frac{E}{RT_s} \left(\frac{T_s - T_o}{T_s} \right)^2 = \Gamma_{c,2} \quad (6.3)$$

y en la esquina

$$\delta Y \sim \frac{\Gamma_c}{\varepsilon} = \frac{c_p T_s}{q} \frac{T_s - T_o}{T_s} = \Gamma_{c,1} \quad (6.4)$$

Como antes los efectos del consumo de reactante son despreciables si en cada caso el parámetro correspondiente verifica $\Gamma_{c,i} \ll 1$. Cuando este parámetro es de orden unidad el consumo es importante y, de modo análogo a lo que ocurre cuando $D_a = \mathcal{O}(1)$, el combustible se agota, pero sólo en la zona de reacción que es pequeña comparada con el tamaño del sólido. Conforme la onda térmica va penetrando en éste, calienta capas de reactante más interiores a las que se propaga la reacción. De esta manera se genera un frente de reacción que avanza hacia el interior del sólido. Las condiciones bajo las cuales el frente es capaz de producir la ignición no son evidentes pero en todo caso el tiempo de ignición aumenta, pudiendo incluso cambiar de orden de magnitud.

El objetivo de este capítulo es estudiar la influencia del consumo de reactante en la ignición de sólidos infinitos planos (modelo unidimensional) y con forma de esquina (modelo bidimensional), esto supone considerar que se verifica, respectivamente, $\varepsilon^2 D_a \gg 1$ y $\varepsilon D_a \gg 1$. En el análisis de cada modelo consideraremos de forma independiente valores del parámetro característico $\Gamma_{c,i}$ de orden ε , orden unidad y orden $1/\varepsilon$. Se pretende, por una parte, determinar la variación del tiempo de ignición en función del parámetro adimensional asociado al calor de reacción y, por otra, analizar la existencia de un rango de valores del mismo en el cual deje de producirse la ignición en un tiempo finito.

6.2 FORMULACION DEL MODELO UNIDIMENSIONAL

La formulación de la primera aproximación para el caso unidimensional ha sido realizada por Liñán y Williams [LW3], si bien no se presentaron resultados numéricos. Realizaremos aquí una formulación completa que permitirá retener los efectos no estacionarios cuando sea preciso.

Las ecuaciones de conservación de la energía y de la especie Y pueden escribirse como:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + q \rho Y B e^{-E/RT} \quad (6.5a)$$

$$\rho \frac{\partial Y}{\partial t} = -\rho Y B e^{-E/RT} \quad (6.5b)$$

y cuyas condiciones de contorno e iniciales son:

$$t = 0: \quad T(x, 0) - T_o = Y(x, 0) - 1 = 0 \quad (6.5c)$$

$$x = 0: \quad T(0, t) = T_s \quad (6.5d)$$

$$x = \infty: \quad T_x(\infty, t) = 0 \quad (6.5e)$$

que corresponden al análisis del proceso de ignición cuando la temperatura superficial de un sólido reactivo se incrementa bruscamente desde el valor inicial T_o al valor T_s . Mediante los parámetros adimensionales:

$$\alpha = (T_s - T_o)/T_s \quad (6.6a)$$

$$\varepsilon = RT_s^2/E(T_s - T_o) \quad (6.6b)$$

$$\gamma = \frac{c_p RT_s^2}{\pi q \varepsilon^2 E} = \frac{c_p T_s}{q} \frac{E}{RT_s} \frac{\alpha^2}{\pi} = \frac{\Gamma_{c,2}}{\pi} \quad (6.6c)$$

los valores característicos del tiempo de ignición y del espesor de la capa de conducción en ese tiempo:

$$t_c = \frac{D \alpha c_p T_s}{2 \pi q B \varepsilon e^{E/RT_s}} \quad (6.6d)$$

$$x_c^2 = \frac{\lambda}{\rho c_p} t_c \quad (6.6e)$$

y las variables adimensionales:

$$\varphi = (T - T_o)/(T_s - T_o) \quad (6.6f)$$

$$\tau = t/t_c \quad (6.6g)$$

$$\xi = x/x_c \quad (6.6h)$$

las ecuaciones y condiciones de contorno pueden escribirse como:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \Delta \varphi + \frac{DY}{2\pi\varepsilon} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad (6.7a)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \tau} = -\frac{\gamma DY}{2} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad (6.7b)$$

$$\tau = 0: \quad \varphi(\xi, 0) = Y(\xi, 0) - 1 = 0 \quad (6.7c)$$

$$\xi = 0: \quad \varphi(0, \tau) - 1 = 0 \quad (6.7d)$$

$$\xi = \infty: \quad \varphi_\xi(\infty, \tau) = 0 \quad (6.7e)$$

donde D es una constante de orden unidad a determinar con la condición de que la ignición tenga lugar en $\tau = 1$, y γ es un nuevo parámetro que mide la importancia del efecto del consumo de combustible.

De nuevo se encuentra que en ausencia de reacción ($B = 0$) la solución es la correspondiente a la conducción inerte de calor desde la pared ($\xi = 0$) hacia el interior del sólido dada por

$$\varphi_i(\xi, \tau) = \operatorname{erfc}(\xi/2\sqrt{\tau}) \quad (6.8)$$

Tomando como variable $\psi = (\varphi - \varphi_i)/\varepsilon$ las ecuaciones y condiciones de contorno e iniciales pasan a ser:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \frac{DY}{2\pi\varepsilon} \exp \left[\frac{\psi + (\varphi_i - 1)/\varepsilon}{1 + \alpha\varepsilon\psi + \alpha(\varphi_i - 1)} \right] \quad (6.9a)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \tau} = -\frac{\gamma DY}{2} \exp \left[\frac{\psi + (\varphi_i - 1)/\varepsilon}{1 + \alpha\varepsilon\psi + \alpha(\varphi_i - 1)} \right] \quad (6.9b)$$

$$\tau = 0: \quad \psi(\xi, 0) = Y(\xi, 0) - 1 = 0 \quad (6.9c)$$

$$\xi = 0: \quad \psi(0, \tau) = 0 \quad (6.9d)$$

$$\xi = \infty: \quad \psi_\xi(\infty, \tau) = 0 \quad (6.9e)$$

Como antes pueden identificarse dos regiones: una exterior donde $\varphi_i - 1 = \mathcal{O}(1)$ y otra interior en la cual $\varphi_i - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$. En la exterior la reacción está congelada y las ecuaciones se reducen a:

$$\frac{\partial \psi_c}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \psi_c}{\partial \xi^2}; \quad \psi_c(\xi, 0) = \psi_{c,\xi}(\infty, \tau) = 0 \quad (6.10a)$$

$$\frac{\partial Y_c}{\partial \tau} = 0; \quad Y_c(\xi, 0) = 1 \quad (6.10b)$$

siendo, por tanto, una región de conducción no estacionaria de calor. Obsérvese que es necesario eliminar la condición de contorno para ψ_c en $\xi = 0$ que tiene que obtenerse mediante el acoplamiento con la solución interior. Una vez determinada $\psi_c(0, \tau)$, la solución de la ecuación (6.10a) puede ponerse, mediante la transformada de Laplace, en la forma:

$$\psi_c(\xi, \tau) = \int_0^\tau \operatorname{erfc} \left(\frac{\xi}{2\sqrt{\tau - \tau'}} \right) \frac{d\psi_c(0, \tau')}{d\tau'} d\tau' \quad (6.11)$$

La zona de reacción está situada donde $\varphi_i - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$ que, teniendo en cuenta el desarrollo de (6.8), corresponde a $\xi = \mathcal{O}(\varepsilon)$ y, por tanto, la variable espacial apropiada es $\eta = \xi/\varepsilon\sqrt{\pi\tau}$ de orden unidad. Las condiciones de contorno en $\eta \rightarrow \infty$ se determinan acoplando con la solución exterior. Para la concentración del reactante es inmediato obtener $Y(\infty, \tau) = 1$ y para la temperatura debe verificarse la siguiente condición

$$\lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ \sigma = \text{cte}}} \frac{1}{\varepsilon^n} [\psi_c(\nu\sigma, \tau) - \psi(\nu\sigma/\varepsilon\sqrt{\pi\tau}, \tau)] = 0$$

siendo ν una función de ε tal que $\varepsilon \ll \nu \ll 1$. Si para $\eta \rightarrow \infty$ y $\xi \rightarrow 0$ es:

$$\psi(\eta, \tau) = A(\tau) + \eta B(\tau) + \dots$$

$$\psi_c(\xi, \tau) = \psi_c(0, \tau) + \psi_{c,\xi}(0, \tau)\xi + \dots$$

se obtienen las siguientes relaciones

$$A(\tau) = \varphi_c(0, \tau)$$

$$B(\tau) = \varepsilon\sqrt{\pi\tau}\psi_{c,\xi}(0, \tau)$$

A partir de (6.11) se obtiene

$$\psi_{c,\xi}(0, \tau) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\tau \frac{d\psi_c(0, \tau')}{d\tau'} \frac{d\tau'}{\sqrt{\tau - \tau'}} \quad (6.12)$$

con lo cual la condición de contorno en $\eta \rightarrow \infty$ para ψ puede expresarse mediante:

$$B(\tau) = -\varepsilon\sqrt{\tau} \int_0^\tau \frac{dA(\tau')}{d\tau'} \frac{d\tau'}{\sqrt{\tau - \tau'}} \quad (6.13)$$

En consecuencia las ecuaciones y condiciones de contorno e iniciales que constituyen el modelo unidimensional son:

$$\pi\varepsilon^2 \left[\tau \frac{\partial\psi}{\partial\tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial\psi}{\partial\eta} \right] = \frac{\partial^2\psi}{\partial\eta^2} + \frac{D\tau}{2} Y \exp \left[\frac{\psi - \operatorname{erf}(\varepsilon\sqrt{\pi}\eta/2)/\varepsilon}{1 + \alpha\varepsilon\psi - \alpha\operatorname{erf}(\varepsilon\sqrt{\pi}\eta/2)} \right] \quad (6.14a)$$

$$\psi(\eta, 0) = \psi(0, \tau) = 0 \quad (6.14b)$$

$$\left. \begin{aligned} \eta \rightarrow \infty : \quad \psi(\eta, \tau) &= A(\tau) + \eta B(\tau) + \dots \\ B(\tau) &= -\varepsilon\sqrt{\tau} \int_0^\tau \frac{dA(\tau')}{d\tau'} \frac{d\tau'}{\sqrt{\tau - \tau'}} \end{aligned} \right\} \quad (6.14c)$$

$$\tau \frac{\partial Y}{\partial\tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y}{\partial\eta} = -\frac{\gamma D}{2} \tau Y \exp \left[\frac{\psi - \operatorname{erf}(\varepsilon\sqrt{\pi}\eta/2)/\varepsilon}{1 + \alpha\varepsilon\psi - \alpha\operatorname{erf}(\varepsilon\sqrt{\pi}\eta/2)} \right] \quad (6.14d)$$

$$Y(\eta, 0) = Y(\infty, \tau) = 1 \quad (6.14e)$$

Nótese que los efectos no estacionarios asociados a la temperatura intervienen en la ecuación (6.14a) y en la condición de contorno (6.14c), siendo de orden ε^2 y ε respectivamente. Por tanto en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ la evolución de la temperatura en la zona de reacción es cuasiestacionaria y la condición (6.14c) se reduce a $\psi_\eta(\infty, \tau) = 0$, que es la formulación del problema realizada por Liñán y Williams.

6.3. FORMULACION DEL MODELO BIDIMENSIONAL

Formularemos aquí el modelo de la ignición con consumo de reactante correspondiente a un sólido semiinfinito limitado por los planos $\theta = 0$ y $\theta = \pi/2$. Es decir, de todos los casos bidimensionales analizados anteriormente bajo la hipótesis $q = \infty$ consideraremos únicamente el estudiado en el capítulo 3, que constituye lo que podríamos denominar el "problema bidimensional modelo".

Con idénticas hipótesis a las realizadas en el apartado anterior respecto de la reacción química, las ecuaciones en coordenadas polares de conservación de la energía

y del reactante junto con las condiciones de contorno e iniciales apropiadas son:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T + \rho Y q B e^{-E/RT} \quad (6.15a)$$

$$\rho \frac{\partial Y}{\partial t} = -\rho Y B e^{-E/RT} \quad (6.15b)$$

$$t = 0: \quad T(\tilde{r}, \theta, 0) - T_o = Y(\tilde{r}, \theta, 0) - 1 = 0 \quad (6.15c)$$

$$\theta = 0: \quad T(\tilde{r}, 0, t) - T_s = 0 \quad (6.15d)$$

$$\theta = \pi/4: \quad T_\theta(\tilde{r}, \pi/4, t) = 0 \quad (6.15e)$$

$$\tilde{r} = \infty: \quad T_{\tilde{r}}(\infty, \theta, t) = 0 \quad (6.15f)$$

definidas en $\tilde{r} > 0$, $\theta \in]0, \pi/4[$, $t > 0$.

Para adimensionalizar estas ecuaciones empleamos los mismos parámetros y variables adimensionales que en el capítulo 3, si bien en este caso es necesario introducir un nuevo parámetro, Γ , que mide, como antes, la importancia del efecto del consumo del reactante.

Los parámetros, valores característicos y variables adimensionales son:

$$\alpha = (T_s - T_o)/T_s \quad (6.16a)$$

$$\varepsilon = RT_s^2/E(T_s - T_o) \quad (6.16b)$$

$$\Gamma = c_p RT_s^2/\pi q \varepsilon E = c_p T_s \alpha/\pi q = \Gamma_{c,1}/\pi \quad (6.16c)$$

$$t_c = D \alpha c_p T_s/\pi q B e^{-E/RT_s} \quad (6.16d)$$

$$r_c^2 = \lambda t_c/\rho c_p \quad (6.16e)$$

$$\varphi = (T - T_o)/(T_s - T_o) \quad (6.16f)$$

$$\tau = t/t_c \quad (6.16g)$$

$$r = \tilde{r}/r_c \quad (6.16h)$$

La constante D en (6.16c) es igual al valor de τ_{lim} correspondiente al caso $\Gamma = 0$, es decir $D = 2.547$, de manera que en las nuevas variables la ignición ocurre en $\tau = 1$.

Obsérvese que, como consecuencia de que el tiempo característico bidimensional definido en (6.16d) es de orden ε frente al unidimensional (6.6d), el parámetro Γ bidimensional (6.16c) es también de orden ε frente a γ (6.6c).

En las nuevas variables, las ecuaciones y condiciones de contorno se escriben como:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \Delta \varphi + \frac{DY}{\pi} \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad (6.17a)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \tau} = -\Gamma DY \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\varphi - 1}{1 + \alpha(\varphi - 1)} \right] \quad (6.17b)$$

$$\tau = 0: \quad \varphi(r, \theta, 0) = Y(r, \theta, 0) - 1 = 0 \quad (6.17c)$$

$$\theta = 0: \quad \varphi(r, 0, \tau) - 1 = 0 \quad (6.17d)$$

$$\theta = \pi/4: \quad \varphi_\theta(r, \pi/4, \tau) = 0 \quad (6.17e)$$

$$r = \infty: \quad \varphi_r(\infty, \theta, \tau) = 0 \quad (6.17f)$$

Mediante el mismo procedimiento empleado hasta ahora, al considerar la diferencia entre la temperatura φ y la temperatura generada por la conducción inerte de calor φ_i , que se calcula haciendo $B = 0$, pueden identificarse dos regiones: exterior e interior. En la exterior, situada en $\xi = \mathcal{O}(1)$, la reacción está congelada por efecto de la temperatura inerte mientras que en la interior tiene lugar la reacción química al ser $\varphi_i - 1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$. A consecuencia del efecto geométrico no existe interacción entre ambas zonas lo que, como ya se ha señalado constituye una de las principales diferencias entre el modelo bidimensional y el unidimensional.

Si definimos $\psi = (\varphi - \varphi_i)/\varepsilon$ y tomamos como variable espacial $\xi = r/\sqrt{\pi\varepsilon\tau}$, las ecuaciones y condiciones de contorno e iniciales que describen la evolución de la temperatura y concentración de reactante en la zona de reacción son:

$$\pi\varepsilon \left[\tau \frac{\partial \psi}{\partial \tau} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right] = \Delta \psi + D\tau Y \exp \left[\frac{\psi + (\varphi_i - 1)/\varepsilon}{1 + \alpha\varepsilon\psi + \alpha(\varphi_i - 1)} \right] \quad (6.18a)$$

$$\tau \frac{\partial Y}{\partial \tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y}{\partial \xi} = -\Gamma D\tau Y \exp \left[\frac{\psi + (\varphi_i - 1)/\varepsilon}{1 + \alpha\varepsilon\psi + \alpha(\varphi_i - 1)} \right] \quad (6.18b)$$

$$\tau = 0 : \quad \psi(\xi, \theta, 0) = Y(\xi, \theta, 0) - 1 = 0 \quad (6.18c)$$

$$\theta = 0 : \quad \psi(\xi, 0, \tau) = 0 \quad (6.18d)$$

$$\theta = \pi/4 : \quad \psi_\theta(\xi, \pi/4, \tau) = 0 \quad (6.18e)$$

$$\xi = \infty : \quad \psi_\xi(\infty, \theta, \tau) = Y(\infty, \theta, \tau) - 1 = 0 \quad (6.18f)$$

La condición de contorno en $\xi = \infty$ para ψ es la misma que en (6.17f) debido a la independencia entre la zona de reacción y la de conducción inerte. Esto hace que los efectos no estacionarios asociados a la temperatura sólo intervengan, a diferencia del modelo unidimensional, a través de la derivada temporal lo que supone una importante reducción en el grado de complejidad matemática.

6.4 ANÁLISIS DE UN MODELO SIMPLIFICADO

Las ecuaciones y condiciones (6.14) y (6.18) constituyen dos modelos que aunque son matemáticamente diferentes representan los mismos principios físicos: la variación local de entalpía está determinada por el balance entre la pérdida de calor por conducción y la producción del mismo debido a la reacción química y la variación local de concentración del reactante igual a su consumo a través de la reacción.

Puede generarse un modelo que represente la evolución de un sistema homogéneo, en el cual no existen variaciones espaciales de las propiedades físicas, y que responda a los dos principios anteriores. El análisis del mismo servirá de orientación acerca del comportamiento que cabe esperar del modelo completo.

La formulación de este modelo simplificado se realiza mediante el siguiente sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\varepsilon \tau \frac{d\theta}{d\tau} = -\frac{\theta}{\tau} + \tau y e^\theta \quad \theta(0) = 0 \quad (6.19a)$$

$$\frac{dy}{d\tau} = -\gamma y e^\theta \quad y(0) = 1 \quad (6.19b)$$

Las variaciones temporales se han representado por los mismos términos que en las ecuaciones completas eliminado los términos convectivos. En el término de reacción se ha omitido el factor que contiene a la temperatura inerte cuyo efecto es congelar la reacción en $\eta \rightarrow \infty$. Finalmente la pérdida de calor por conducción se ha modelado

mediante $-\theta/\tau$, lo que puede justificarse si se tiene en cuenta que en la ecuación de conducción del calor, $\theta_\tau = \theta_{\xi\xi}$, los tiempos característicos son del orden del cuadrado de las distancias característicos. La presencia del parámetro ε en (6.19a) significa que la evolución de la temperatura es cuasiestacionaria al igual que en el modelo completo.

Si en (6.19a) hacemos $\varepsilon = 0$, se obtiene

$$y = \theta e^{-\theta}/\tau^2 \quad (6.20)$$

que llevado a (6.19b) genera la siguiente ecuación para θ :

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\theta(2 - t e^\theta)}{t(1 - \theta)} \quad (6.21)$$

donde $t = \gamma\tau$.

Aunque (6.21) carece de solución analítica es posible obtener información cualitativa acerca de la misma. En $t = 0$ y $\theta = 1$ la pendiente es infinita, mientras que en $\theta = 0$ y $t = 2e^{-\theta}$ es nula. El dominio $\theta > 0$, $t > 0$ queda así dividido en cuatro regiones en las que el signo de $d\theta/dt$ es constante. Además existen dos puntos críticos: $(0, 0)$ y $(1, 2/e)$. El análisis del primero es inmediato sin más que hacer en (6.21) $\theta = at + bt^2 + ct^3 + \dots$ obteniéndose $a = 0$, $c = -b$ con $b = 1/\gamma^2$ deducido de (6.20). Por tanto el punto singular es un nodo y para $t \ll 1$ es $\theta = (t^2 - t^3)/\gamma^2 + o(t^3)$. Para analizar el punto $(1, 2/e)$ hacemos $\theta = 1 + \omega$ y $t = 2(1 + \mu)/e$, obteniendo la siguiente ecuación para ω y μ en las proximidades del punto crítico:

$$\frac{d\mu}{d\omega} = \frac{\omega}{2\mu + 2\omega} \quad (6.22)$$

Los autovalores de la matriz $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$ son $\lambda_1 = \sqrt{3} + 1 > 0$ y $\lambda_2 = 1 - \sqrt{3} < 0$, por lo tanto se trata de un puerto cuyas direcciones excepcionales son $\omega = (\sqrt{3} + 1)\mu$ y $\omega = (1 - \sqrt{3})\mu$.

Existe un valor crítico de γ , γ_* , para el cual la curva integral que parte del origen con el comportamiento $\theta = t^2(1 - t)/\gamma_*^2$ alcanza el puerto por la primera de las direcciones excepcionales. Las curvas con $\gamma < \gamma_*$, y por consiguiente $b > b_*$, están situadas a la izquierda y alcanzan la recta $\theta = 1$ donde $d\theta/dt$ no está acotada. Por el contrario las curvas con $\gamma > \gamma_*$ ($b < b_*$) están a la derecha de la separatriz y cortan a $t = 2e^{-\theta}$ con pendiente nula. A partir de ese momento $d\theta/dt$ es negativa con lo cual

$\theta \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \infty$. En consecuencia existen tres situaciones bien diferenciadas (fig. 6.1):

- a) Si $\gamma < \gamma_*$, $d\theta/dt$ se hace infinita en un tiempo finito, creciente con γ , cuando la temperatura alcanza el valor $\theta = 1$. En ese momento tiene lugar la ignición, existiendo todavía cierta cantidad de reactante que alimentará la reacción en los instantes posteriores, cuya descripción debe hacerse reteniendo la derivada temporal. De hecho ya antes de la ignición, cuando $d\theta/d\tau = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$, sería necesario retenerla.
- b) Si $\gamma > \gamma_*$ la temperatura comienza a disminuir a partir del momento en que la curva integral correspondiente corta a $t = 2e^{-\theta}$. El reactante se va consumiendo hasta que al cabo de un tiempo suficientemente grande la cantidad del mismo es despreciable, produciéndose la extinción.
- c) Si $\gamma = \gamma_*$ la temperatura es siempre creciente y a causa de la presencia del término e^θ en (6.21) $d\theta/dt$ deja de estar acotada en un tiempo finito, pero, a diferencia de a), la temperatura también tiende a infinito, de manera que el reactante se agota. El valor crítico de γ puede determinarse numéricamente y resulta ser $\gamma_* = .7205\dots$

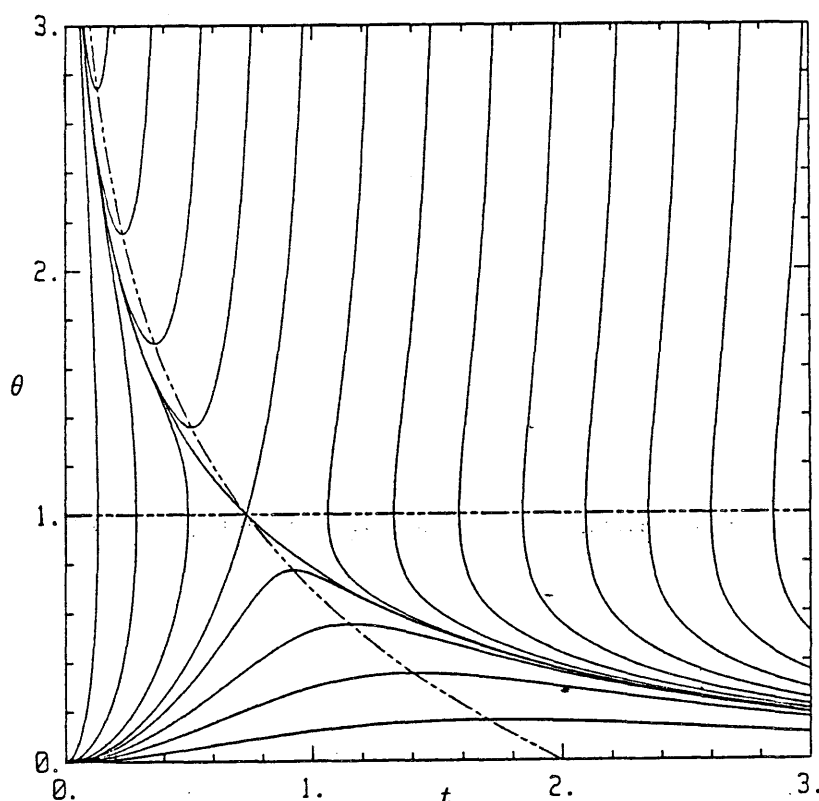


Figura 6.1 Curvas integrales correspondientes a la ecuación 6.21

Obsérvese que por tratarse de un modelo cuasiestacionario la producción y pérdida de calor están siempre compensadas y, por tanto, la ignición debe ser interpretada como un fallo de la hipótesis cuasiestacionaria. Este es consecuencia de que el término de producción de calor aumenta más rápidamente con la temperatura que el asociado a la pérdida de calor existiendo un instante, que corresponde al tiempo de ignición, en que no es posible compensar ambos. Análogamente la extinción no es debida a que la pérdida de calor sea mayor que la producción, sino a que cuando el calor de reacción es suficientemente pequeño es necesario consumir una cantidad apreciable de reactante para elevar la temperatura de forma significativa, lo que a su vez limita el crecimiento del término de producción verificándose siempre la hipótesis cuasiestacionaria. Finalmente se produce la extinción por agotamiento del reactante disponible.

La conclusión que puede extraerse del análisis de este modelo simplificado en relación con el modelo completo es la posible existencia de dos regímenes: uno de ignición, para valores del parámetro γ menores que un cierto valor crítico y otro de extinción para valores de γ mayores.

6.5. RESOLUCION DEL CASO UNIDIMENSIONAL

La solución del problema unidimensional (6.14) se busca como un desarrollo en serie de potencias de la forma

$$\begin{aligned}\psi &= \psi_0 + \varepsilon\psi_1 + \varepsilon^2\psi_2 + \dots \\ Y &= Y_0 + \varepsilon Y_1 + \varepsilon^2 Y_2 + \dots\end{aligned}\tag{6.23}$$

que llevados a (6.14a) y (6.14d) dan lugar a los problemas de orden unidad, ε , ε^2 , etc para calcular las funciones ψ_i e Y_i . Además si para $\eta \rightarrow \infty$ suponemos que cada ψ_i es de la forma $\psi_i = A_i(\tau) + \eta B_i(\tau) + \dots$ de la relación (6.14c) se obtienen las siguientes relaciones para los dos primeros términos:

$$\begin{aligned}B_0 &= 0 \\ B_1 &= -\sqrt{\tau} \int_0^\tau \frac{dA_0(\tau')}{d\tau'} \frac{d\tau'}{\sqrt{\tau - \tau'}}\end{aligned}\tag{6.24}$$

Analizaremos a continuación el problema (6.14) en los casos $\gamma \ll 1$, $\gamma = \mathcal{O}(1)$ y $\gamma \gg 1$.

6.5.1. Análisis cuando $\gamma \ll 1$

Si el consumo de reactante es despreciable puede ponerse, en primera aproximación, $\gamma = 0$ en (6.14) con lo que se obtiene $Y_o \equiv 1$ y el problema se reduce al analizado por Liñán y Williams [LW3]. La solución del mismo muestra que el valor de la constante D que determina el tiempo de ignición dimensional es, en primera aproximación, $D = 1$. Este valor puede corregirse al incluir los efectos no estacionarios que aparecen a través de la condición de contorno en $\eta \rightarrow \infty$, siendo esta corrección de orden $\varepsilon \ln \varepsilon$. Cuando se considera $\gamma \ll 1$ pero no nulo aparece una nueva corrección, proporcional a γ , que se obtiene perturbando el problema de orden unidad mediante

$$\psi_o = \psi_{00} + \gamma \psi_{01} + \dots$$

$$Y_o = Y_{00} + \gamma Y_{01} + \dots$$

La situación más interesante corresponde al límite distinguido en que $\gamma = \mathcal{O}(\varepsilon)$ que será estudiado a continuación.

Sea

$$\gamma = \hat{\gamma} \varepsilon \quad (6.25)$$

con $\hat{\gamma} = \mathcal{O}(1)$, llevando esta expresión y (6.23) a (6.14) se obtienen los siguientes problemas para ψ_o e Y_o :

$$\frac{\partial^2 \psi_o}{\partial \eta^2} + \frac{D\tau}{2} Y_o e^{\psi_o - \eta} = 0; \quad \psi_o(0, \tau) = \psi_o, \eta(\infty, \tau) = 0 \quad (6.26a)$$

$$\tau \frac{\partial Y_o}{\partial \tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y_o}{\partial \eta} = 0; \quad Y_o(\eta, 0) = Y_o(\infty, \tau) = 1 \quad (6.26b)$$

La solución de (6.26b) es evidentemente $Y_o(\eta, \tau) = 1$, con este resultado y tomando $\psi_o - \eta$ como variable independiente (6.26a) puede integrarse para dar:

$$\psi_o(\eta, \tau) = 2 \ln \left\{ \frac{2(1 - \sqrt{1 - D\tau})}{D\tau + (1 - \sqrt{1 - D\tau})^2 e^{-\eta}} \right\} \quad (6.27)$$

Esta solución es válida mientras $D\tau \leq 1$, pero $\partial \psi_o / \partial \tau = D / (1 - D\tau + \sqrt{1 - D\tau})$ no está acotada cuando $D\tau \rightarrow 1$, lo que indica, por una parte, que la ignición tiene lugar, en primera aproximación, cuando $D\tau = 1$, de donde $D = 1$, y, por otra, la necesidad de incluir los efectos no estacionarios cuando $1 - D\tau \ll 1$.

Como puede comprobarse el operador lineal F definido mediante $F[\phi] \equiv \partial^2 \phi / \partial \eta^2 + f(\eta)\phi$, $\phi(0) = \phi_\eta(\infty) = 0$ es autoadjunto y por tanto, [ST, p.319] el problema $F[\phi] = u$ tiene solución si u es ortogonal a las funciones del núcleo de F , es decir si $\langle u, v^* \rangle = 0$ con $F[v^*] = 0$. Este resultado será ampliamente utilizado en lo que sigue.

Si en $D\tau = 1$ $\partial\psi_o/\partial\tau$ no está acotada, el problema

$$\frac{\partial^2 \psi_{o,\tau}}{\partial \eta^2} + \frac{D\tau}{2} \psi_{o,\tau} e^{\psi_o - \eta} = -\frac{D}{2} e^{\psi_o - \eta}; \quad \psi_{o,\tau}(0, \tau) = (\psi_{o,\tau})_\eta(\infty, \tau) = 0 \quad (6.28)$$

carece de solución y, por tanto, debe existir una autofunción, ϕ , no nula que verifique

$$L[\phi] \equiv \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + \frac{1}{2} \phi e^{\theta_o - \eta} = 0; \quad \phi(0) = \phi_\eta(\infty) = 0 \quad (6.29)$$

donde $\theta_o(\eta) = \psi_o(\eta, 1) = 2 \ln(2/(1 + e^{-\eta}))$, y tal que $\int_0^\infty \phi e^{\theta_o - \eta} d\eta \neq 0$.

De (6.29) se obtiene

$$\phi(\eta) = \frac{1 - e^{-\eta}}{1 + e^{-\eta}} \quad (6.30)$$

con $\phi(\infty) = 1$, aunque podría haberse tomado cualquier función proporcional a ϕ , y para la cual $\int_0^\infty \phi e^{\theta_o - \eta} d\eta \neq 0$ pues el integrando es positivo.

Para ψ_1 e Y_1 , se encuentran los siguientes problemas lineales:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \eta^2} + \frac{D\tau}{2} e^{\psi_o - \eta} [Y_o \psi_1 + Y_1 - \alpha(\psi_o - \eta)^2 Y_o] &= 0 \\ \psi_1(0, \tau) &= 0; \quad \psi_1(\eta \rightarrow \infty, \tau) = A_1(\tau) + \eta B_1(\tau) \end{aligned} \right\} \quad (6.31a)$$

$$\left. \begin{aligned} \tau \frac{\partial Y_1}{\partial \tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y_1}{\partial \eta} + \hat{\gamma} D \frac{\tau}{2} Y_o e^{\psi_o - \eta} &= 0 \\ Y_1(\eta, 0) &= Y_1(\infty, \tau) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (6.31b)$$

que deben resolverse numéricamente una vez calculada la función $B_1(\tau)$. Para realizar la integración numérica es conveniente emplear como variable independiente en (6.31a) $\bar{\psi}_1$ definida mediante $\bar{\psi}_1 = \psi_1 - \eta B_1$, de manera que (6.31a) pasa a ser:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \bar{\psi}_1}{\partial \eta^2} + \frac{D\tau}{2} e^{\psi_o - \eta} [\bar{\psi}_1 Y_o + Y_1 - \alpha(\psi_o - \eta)^2 Y_o + \eta Y_o B_1(\tau)] &= 0 \\ \bar{\psi}_1(0, \tau) &= \bar{\psi}_{1,\eta}(\infty, \tau) = 0 \end{aligned} \quad (6.31c)$$

Teniendo en cuenta que $A_o(\tau) = \psi_o(\infty, \tau) = 2 \ln(2/(1 + \sqrt{1 - D\tau}))$, la función $B_1(\tau)$ es:

$$B_1(\tau) = -\sqrt{\tau} \int_0^\tau \frac{D}{\sqrt{1 - D\tau'} (1 + \sqrt{1 - D\tau'})} \frac{d\tau'}{\sqrt{\tau - \tau'}} = \ln(1 - D\tau) \quad (6.32)$$

Obsérvese que cuando $1 - D\tau \ll 1$ B_1 presenta una divergencia logarítmica, de manera que las relaciones (6.24) no son válidas y en consecuencia la condición de contorno $\psi_{o,\eta}(\infty, \tau) = 0$ no es correcta. Modificar $\psi_{o,\eta}(\infty, \tau)$ a causa de esta divergencia representa retener parte de los efectos no estacionarios cuando $1 - D\tau \ll 1$.

Pueden, por tanto, distinguirse dos etapas: una inicial correspondiente a $1 - \tau = \mathcal{O}(1)$ y en la cual la concentración y temperatura están determinados por (6.27) y las soluciones de (6.31), y otra de transición que corresponde a $1 - \tau \ll 1$ y durante la cual tiene lugar la ignición. La descripción de esta etapa debe hacerse empleando una escala de tiempo corta e incluyendo los efectos no estacionarios. Para encontrar la escala apropiada y disponer de expresiones que permitan posteriormente realizar el "matching" entre ambas etapas hay que analizar la forma de ψ_o , ψ_1 e Y_1 cuando $1 - \tau \ll 1$.

6.5.1.1 Soluciones de la etapa inicial en $1 - \tau \ll 1$

Si llamamos $\hat{\tau} = 1 - \tau$ con $\hat{\tau} = o(1)$, la solución de (6.26a) puede ponerse como:

$$\psi_o(\eta, \hat{\tau}) = \theta_o(\eta) + \lambda_1(\hat{\tau})\theta_1(\eta) + \lambda_2(\hat{\tau})\theta_2(\eta) + \dots \quad (6.33)$$

donde λ_1 y λ_2 son funciones de $\hat{\tau}$ que verifican:

$$\lim_{\hat{\tau} \rightarrow 0} \lambda_1(\hat{\tau}) = \lim_{\hat{\tau} \rightarrow 0} \frac{\lambda_2(\hat{\tau})}{\lambda_1(\hat{\tau})} = 0$$

Llevando (6.33) a (6.26a) se obtiene el siguiente problema para θ_1 :

$$\mathbf{L}[\theta_1] = \frac{\hat{\tau}}{\lambda_1} \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} + o(1); \quad \theta_1(0) = \theta_{1,\eta}(\infty) = 0 \quad (6.34)$$

Dado que el problema homogéneo posee autofunción no nula la condición de resolubilidad es:

$$\lim_{\hat{\tau} \rightarrow 0} \frac{\hat{\tau}}{\lambda_1} \int_0^\infty \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} \phi(\eta) d\eta = 0$$

y al ser el integrando positivo debe verificarse $\hat{\tau} \ll \lambda_1$, con lo cual la solución para θ_1 es $\theta_1 = \phi$.

El problema para θ_2 es:

$$\mathbf{L}[\theta_2] = \frac{\hat{\tau}}{\lambda_2} \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} - \frac{\lambda_1^2}{\lambda_2} \frac{1}{4} \phi^2 e^{\theta_o - \eta}; \quad \theta_2(0) = \theta_{2,\eta}(\infty) = 0 \quad (6.35)$$

cuya condición de resolubilidad es:

$$\lim_{\hat{\tau} \rightarrow 0} \frac{\hat{\tau}}{\lambda_2} \int_0^\infty \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} d\eta = \lim_{\hat{\tau} \rightarrow 0} \frac{\lambda_1^2}{\lambda_2} \int_0^\infty \frac{1}{4} e^{\theta_o - \eta} \phi^3(\eta) d\eta$$

teniendo en cuenta que el valor de las integrales es $1/2$ y $1/8$, respectivamente, se deduce $\lambda_2 = \hat{\tau}$ y $\lambda_1^2 = 4\hat{\tau}$. Como la temperatura es creciente debe tomarse $\lambda_1 = -2\sqrt{\hat{\tau}}$, con lo cual si $1 - \tau \ll 1$ se verifica:

$$\psi_o(\eta, \tau) = \theta_o(\eta) - 2\sqrt{1 - \tau}\phi(\eta) + o(\sqrt{1 - \tau}) \quad (6.36)$$

La solución de (6.31c) se busca en la forma:

$$\bar{\psi}_1(\eta, \hat{\tau}) = \nu_1(\hat{\tau})\varphi_1(\eta) + \nu_2(\hat{\tau})\varphi_2(\eta) + \dots$$

Mediante (6.36) y con $Y_1(\eta, \hat{\tau}) = y_1(\eta) - (\partial Y_1(\eta, 1)/\partial \tau)\hat{\tau}$, donde $y_1(\eta) = Y_1(\eta, 1)$, la ecuación para φ_1 es:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}[\varphi_1] &= -\frac{1}{2\nu_1} e^{\theta_o - \eta} \left[y_1(\eta) - \alpha(\theta_o - \eta)^2 + 2\eta \ln \sqrt{\hat{\tau}} \right] + o(1) \\ \varphi_1(0) &= \varphi_{1,\eta}(\infty) = 0 \end{aligned} \quad (6.37)$$

Empleando nuevamente la condición de resolubilidad se obtiene:

$$\lim_{\hat{\tau} \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\nu_1} \int_0^\infty \frac{1}{2} \phi e^{\theta_o - \eta} (y_1(\eta) - \alpha(\theta_o - \eta)^2) d\eta + \frac{\ln \sqrt{\hat{\tau}}}{\nu_1} \int_0^\infty \eta e^{\theta_o - \eta} \phi d\eta \right\} = 0$$

La primera integral es negativa, pues $Y_1(\eta, \tau) \leq 0$, y la segunda positiva con lo cual debe verificarse que $1/\nu_1 = o(1)$ y $\ln \sqrt{\hat{\tau}}/\nu_1 = o(1)$, y por tanto puede tomarse $\varphi_1 = \phi$.

La función $\nu_1(\hat{\tau})$ se determina a partir de la condición de resolubilidad del problema para φ_2 . Este es:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}[\varphi_2] &= -\frac{1}{2\nu_2} e^{\theta_o - \eta} \left[y_1(\eta) - \alpha(\theta_o - \eta)^2 + 2\eta \ln \sqrt{\hat{\tau}} \right] + \frac{\nu_1 \sqrt{\hat{\tau}}}{\nu_2} e^{\theta_o - \eta} \phi^2 \\ \varphi_2(0) &= \varphi_{2,\eta}(\infty) = 0 \end{aligned} \quad (6.38)$$

deduciéndose

$$\nu_1 = -\frac{a_3}{\sqrt{\hat{\tau}}} + a_4 \frac{\ln \sqrt{\hat{\tau}}}{\sqrt{\hat{\tau}}}$$

donde

$$a_3 = \frac{1}{2} \frac{\int_0^\infty (\alpha(\theta_o - \eta)^2 - y_1(\eta)) e^{\theta_o - \eta} \phi d\eta}{\int_0^\infty e^{\theta_o - \eta} \phi^3 d\eta} = 2\alpha + .096\Gamma\hat{\gamma}$$

$$a_4 = \frac{\int_0^\infty \eta e^{\theta_o - \eta} \phi d\eta}{\int_0^\infty e^{\theta_o - \eta} \phi^3 d\eta} = 4$$

La constante .096 se obtiene teniendo en cuenta que (6.31b) es lineal en $\hat{\gamma}$ y calculando $\int_0^\infty Y_1(\eta, 1) e^{\theta_o - \eta} \phi d\eta$ para $\hat{\gamma} = 1$.

Por tanto para $1 - \tau \ll 1$ se verifica:

$$\psi_1(\eta, \tau) = \left(4 \frac{\ln \sqrt{1 - \tau}}{\sqrt{1 - \tau}} - (2\alpha + .096\hat{\gamma}) \frac{1}{\sqrt{1 - \tau}} \right) \phi(\eta) + \mathcal{O}(1) \quad (6.39)$$

6.5.1.2 Solución en la etapa de transición

Para determinar la escala de tiempos asociada a la etapa de transición podemos comparar, mediante las expresiones anteriores, $\psi_o(\eta, \tau)$ y $\varepsilon\psi_1(\eta, \tau)$ en $1 - \tau \ll 1$. Si omitimos el término logarítmico de ψ_1 que está asociado a la función $B_1(\tau)$, es decir, a la condición de contorno en $\eta \rightarrow \infty$ que será modificada en la etapa de transición, se observa que ψ_o y $\varepsilon\psi_1$ son del mismo orden cuando $1 - \tau = \mathcal{O}(\varepsilon)$. Esto sugiere que en esta nueva etapa las variables a emplear son:

$$\tau = 1 + \varepsilon\tau$$

$$D = 1 + \delta(\varepsilon) \quad (6.40)$$

$$\psi(\eta, \sigma) = \theta_o + \sqrt{\varepsilon}\theta_1(\eta, \sigma) + \varepsilon\theta_2(\eta, \sigma) + \dots$$

$$Y(\eta, \sigma) = 1 + \varepsilon y_1(\eta) + \varepsilon^2 y_2(\eta, \sigma) + \dots$$

La función $\delta(\varepsilon) = o(\varepsilon)$ debe determinarse con la condición de que en $\sigma = 0$ tenga lugar la ignición. Llevando (6.40) a (6.14) se obtiene el siguiente problema para θ_1 :

$$\mathbf{L}[\theta_1] = \frac{\delta}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} + o(1) \quad (6.41)$$

$$\theta_1(0, \sigma) = \theta_{1,\eta}(0, \sigma) = 0.$$

De nuevo la condición de resolubilidad permite escribir $\delta = o(\sqrt{\varepsilon})$ y por tanto

$$\theta_1(\eta, \sigma) = F_1(\sigma)\phi(\eta) \quad (6.42)$$

donde $F_1(\sigma)$ es una función desconocida. Al efectuar el "matching" con la etapa inicial se encuentra que para $\sigma \rightarrow -\infty$ $F_1(\sigma)$ debe verificar, al menor orden,

$$F_1(\sigma) = -2\sqrt{-\sigma} \quad (6.43)$$

El problema para θ_2 es:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}[\theta_2] &= \frac{1}{2} \frac{\delta}{\varepsilon} e^{\theta_o - \eta} - \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} \left[\sigma + y_1 - \alpha(\theta_o - \eta)^2 + \frac{1}{2} F_1^2 \phi^2 \right] \\ \theta_2(0, \sigma) &= 0, \quad \theta_{2,\eta} = -\sqrt{1 + \varepsilon\sigma} \int_0^{1+\varepsilon\sigma} \frac{d\psi_o(\infty, \tau')}{d\tau'} \frac{d\tau'}{\sqrt{1 + \varepsilon\sigma - \tau'}} \end{aligned} \quad (6.44)$$

La integral anterior representa el efecto acumulativo de la variación temporal de $\psi(\infty, \tau)$ debiendo contabilizarse tanto el correspondiente a la etapa inicial como a la de transición. Al ser la expresión de ψ distinta en ambas es útil calcular independientemente la contribución de cada etapa a la integral completa. Para ello dividimos el intervalo $[0, 1 + \varepsilon\sigma]$ en los intervalos $[0, 1 - k\varepsilon]$ y $[1 - k\varepsilon, 1 + \varepsilon\sigma]$ siendo $1 \ll k \ll 1/\varepsilon$, y denominamos I_1 e I_2 a las integrales respectivas. En I_1 $1 - \tau = \mathcal{O}(1)$ constituyendo la contribución de la etapa inicial en la cual ψ está dada por (6.27) mientras que en I_2 $1 - \tau = \mathcal{O}(\varepsilon)$ y ψ está definida por (6.40) correspondiendo a la etapa de transición. Las expresiones para I_1 e I_2 son:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^{1-k\varepsilon} \frac{1 - \sqrt{1 - D\tau'}}{\tau' \sqrt{1 - D\tau'}} \frac{d\tau'}{\sqrt{1 + \varepsilon\sigma - \tau'}} = \int_0^{1-k\varepsilon} \frac{1 - \sqrt{1 - \tau'}}{\tau' \sqrt{1 - \tau'}} \frac{d\tau'}{\sqrt{1 + \varepsilon\sigma - \tau'}} + \mathcal{O}(\delta) \\ I_2 &= \int_{-k}^{\sigma} \frac{dF_1(\sigma')}{d\sigma'} \frac{d\sigma'}{\sqrt{\sigma - \sigma'}} \end{aligned}$$

Obsérvese que en virtud de (6.32) y (6.43) ambas integrales poseen una singularidad logarítmica en $k = 0$ y $k = \infty$ respectivamente. Es importante contabilizar esta divergencia de manera adecuada, es decir, independientemente de cual sea el valor de k . Para ello expresamos I_1 como

$$I_1 = \int_0^{1+\varepsilon\sigma} - \int_{1-k\varepsilon}^{1+\varepsilon\sigma} = I_{11} + I_{12}$$

La primera de ellas puede integrarse para dar

$$I_{11} = -\frac{\ln(-\varepsilon\sigma)}{\sqrt{1 + \varepsilon\sigma}}$$

mientras que si en la segunda hacemos $\tau' = 1 + \varepsilon\sigma'$ se obtiene:

$$I_{12} = \int_{-k}^{\sigma} \frac{1 - \sqrt{-\varepsilon\sigma'}}{(1 + \varepsilon\sigma')\sqrt{-\varepsilon\sigma'}} \frac{\varepsilon d\sigma'}{\sqrt{\varepsilon(\sigma - \sigma')}} = \int_{-k}^{\sigma} \frac{d\sigma'}{\sqrt{-\sigma'}\sqrt{\sigma - \sigma'}} + \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}).$$

Finalmente podemos escribir $\theta_{2,\eta}(\infty, \sigma)$ en la forma:

$$\theta_{2,\eta}(\infty, \sigma) = \ln(-\varepsilon\sigma) - \int_{-k}^{\sigma} \left(\frac{dF_1(\sigma')}{d\sigma'} - \frac{1}{\sqrt{-\sigma'}} \right) \frac{d\sigma'}{\sqrt{\sigma - \sigma'}} + \mathcal{O}(\delta, \sqrt{\varepsilon}).$$

Haciendo $\theta_2(\eta, \sigma) = \bar{\theta}_2(\eta, \sigma) + \eta\theta_{2,\eta}(\infty, \sigma)$ el problema (6.44) pasa a ser:

$$\mathbf{L}[\bar{\theta}_2] = \frac{1}{2}e^{\theta_o - \eta} \left[\sigma + \frac{\delta}{\varepsilon} + y_1 - \alpha(\theta_o - \eta)^2 + \frac{1}{2}F_1^2\phi^2 + \eta\theta_{2,\eta}(\infty, \sigma) \right] \quad (6.45)$$

$$\bar{\theta}_2(0, \sigma) = \bar{\theta}_{2,\eta}(\infty, \sigma) = 0$$

cuya condición de resolubilidad es:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\delta}{\varepsilon} + \sigma \right) \int_0^{\infty} \frac{1}{2} \phi e^{\theta_o - \eta} d\eta - \int_0^{\infty} \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} (\alpha(\theta_o - \eta)^2 - y_1) \phi d\eta + \\ & \frac{1}{2} F_1^2 \int_0^{\infty} \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} \phi^3 d\eta + \ln(-\varepsilon\sigma) \int_0^{\infty} \frac{1}{2} \eta e^{\theta_o - \eta} \phi d\eta = \\ & \int_{-k}^{\sigma} \left(\frac{dF_1(\sigma')}{d\sigma'} - \frac{1}{\sqrt{-\sigma'}} \right) \frac{d\sigma'}{\sqrt{\sigma - \sigma'}} \int_0^{\infty} \frac{1}{2} \eta e^{\theta_o - \eta} d\eta + \mathcal{O}(\delta, \sqrt{\varepsilon}) \end{aligned}$$

que una vez calculadas las integrales es:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\varepsilon} + \sigma - (2\alpha + .096\tilde{\gamma}) + \frac{1}{4}F_1^2 + 2\ln\varepsilon + 2\ln(-\sigma) = \\ 2 \int_{-k}^{\sigma} \left(\frac{dF_1}{d\sigma'} - \frac{1}{\sqrt{-\sigma'}} \right) \frac{d\sigma'}{\sqrt{\sigma - \sigma'}} + \mathcal{O}(\delta, \sqrt{\varepsilon}) \end{aligned}$$

Para que esta condición sea independiente de ε debe verificarse

$$\delta = -2\varepsilon \ln\varepsilon + (2\alpha + .096\tilde{\gamma})\varepsilon + b\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^{3/2}) \quad (6.46)$$

donde b es una constante de orden unidad.

Haciendo $F_1(\sigma) = 2g(\sigma)$ y teniendo en cuenta (6.46) la condición de resolubilidad puede escribirse como:

$$\sigma + g^2 + 2\ln(-\sigma) + b = \int_{-\infty}^{\sigma} \left(4 \frac{dg}{d\sigma'} - \frac{2}{\sqrt{-\sigma'}} \right) \frac{d\sigma'}{\sqrt{\sigma - \sigma'}} \quad (6.47)$$

que es una ecuación integral para determinar la función $g(\sigma)$, que debe integrarse con la condición $g \rightarrow -\sqrt{-\sigma}$ para $\sigma \rightarrow -\infty$. Para que la ignición se produzca en $\tau = 1$ la función g determinada por (6.47) debe ser divergente en $\sigma = 0$, lo que permite calcular b . Esta es la misma ecuación que encontraron y resolvieron Liñán y Williams [LW3] al analizar el caso $\gamma = 0$. Los detalles de la resolución numérica, que aquí se ha llevado a cabo mediante un método ligeramente diferente, y del cálculo de b se encuentran en el apéndice 6.1. La figura 6.2 muestra la gráfica de la función g solución de (6.47) con $b = 5.123\dots$, valor para el cual $g \rightarrow \infty$ cuando $\sigma \rightarrow 0$.

Como resultado del análisis efectuado se encuentra que tanto la temperatura como la concentración sufren modificaciones de orden ε respecto del caso $\gamma = 0$. Es decir, en la etapa inicial ψ_o e Y_o permanecen invariables y lo mismo ocurre en la etapa de transición con θ_o y θ_1 . Si se emplea como tiempo característico el tiempo químico $t_q = c_p(RT_s^2/E)/qBe^{-E/RT}$, el tiempo adimensional es $\hat{t} = D\tau/2\pi\varepsilon^2$, y en esta variable la ignición ocurre en $D/2\pi\varepsilon^2$. Observando que (6.46) puede escribirse como $\delta = \delta(\gamma = 0) + .096\gamma$, el tiempo de ignición cuando $\gamma = \mathcal{O}(\varepsilon)$ es:

$$\hat{t}_{ig} = \hat{t}_{ig}(\gamma = 0) + \frac{.096}{2\pi} \frac{\gamma}{\varepsilon^2} \quad (6.48)$$

siendo

$$\hat{t}_{ig}(\gamma = 0) = \frac{1}{2\pi\varepsilon^2} (1 + 2\varepsilon \ln(1/\varepsilon) + 2\alpha\varepsilon + b\varepsilon)$$

6.5.2. Análisis cuando $\gamma = \mathcal{O}(1)$

Los problemas para describir la evolución de la concentración y temperatura si $\gamma = \mathcal{O}(1)$ se obtienen introduciendo los desarrollos (6.23) y las relaciones (6.24) en (6.14). Para ψ_o e Y_o se tiene:

$$\frac{\partial^2 \psi_o}{\partial \eta^2} + \frac{D\tau}{2} Y_o e^{\psi_o - \eta} = 0; \quad \psi_o(0, \tau) = \psi_o, \eta(\infty, \tau) = 0 \quad (6.50a)$$

$$\tau \frac{\partial Y_o}{\partial \tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y_o}{\partial \eta} + \gamma D \frac{\tau}{2} Y_o e^{\psi_o - \eta} = 0; \quad Y_o(\eta, 0) = Y_o(\infty, \tau) = 1 \quad (6.50b)$$

que debe resolverse numéricamente para cada valor de γ . Los detalles acerca de la discretización de las ecuaciones, elección del paso temporal, ... etc., se encuentran recogidos en el apéndice A.6.2.

No obstante la complejidad de (6.50) pueden deducirse algunos resultados analíticos que además serán necesarios para la integración numérica. La concentración en $\eta = 0$, $Y(0, \tau)$, puede calcularse a partir de (6.50b) sin más que tener en cuenta $\psi(0, \tau) = 0$, obteniéndose la siguiente ecuación

$$\frac{\partial Y_o(0, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\gamma}{D} 2Y_o(0, \tau); \quad Y_o(0, 0) = 1$$

cuya solución es

$$Y_o(0, \tau) = \exp\left(-\frac{\gamma}{D} 2\tau\right) \quad (6.51)$$

que indica que al cabo de un tiempo de orden $2/\gamma D$, y por tanto más corto cuanto mayor es γ , la concentración en la superficie se hace exponencialmente pequeña. El resto de las funciones Y_i verifican $Y_i(0, \tau) = 0$.

Para tiempos pequeños puede buscarse la solución en la forma $\psi_o(\eta, \tau) = \tau\psi_{01}(\eta) + \dots$ e $Y_o(\eta, \tau) = 1 - \tau Y_{01}(\eta) + \dots$ que llevados a (6.50) dan lugar a las siguientes ecuaciones:

$$\frac{d\psi_{01}}{d\eta^2} + \frac{D}{2}e^{-\eta} = 0; \quad \psi_{01}(0) = \psi_{01,\eta}(\infty) = 0 \quad (6.52a)$$

$$-Y_{01} + \frac{\eta}{2} \frac{dY_{01}}{d\eta} + \frac{\gamma D}{2}e^{-\eta} = 0; \quad Y_{01}(\infty) = 0 \quad (6.52b)$$

cuyas soluciones son:

$$\psi_{01} = \frac{D}{2}(1 - e^{-\eta}) \quad (6.53a)$$

$$Y_{01} = \gamma E_3(\eta) \quad (6.53b)$$

donde $E_n(\eta)$ es la función exponencial integral de orden n definida mediante $E_n(\eta) = \int_1^\infty (e^{-\eta x}/x^n) dx$

Con la solución para tiempos pequeños puede comenzarse la integración del sistema (6.50). Esta se realiza según el método descrito en el apéndice 6.2 y con $D = 1$. Como uno de los resultados que se pretende obtener es el valor del tiempo en el cual se produce la ignición, es decir, el valor máximo de τ para el cual (6.50) admite solución, y éste está caracterizado por la no acotación de $\partial\psi_o/\partial\tau$, además de las ecuaciones (6.50) se resuelve el siguiente problema lineal para calcular $\partial\psi_o/\partial\tau$:

$$\frac{\partial^2 \psi_{o,\tau}}{\partial \eta^2} + \frac{\tau}{2} Y_o e^{\psi_o - \eta} \psi_{o,\tau} = \frac{1}{2} e^{\psi_o - \eta} (\tau Y_{o,\tau} + Y_o) \quad (6.54)$$

$$\psi_{o,\tau}(0, \tau) = (\psi_{o,\tau})_\eta(\infty, \tau) = 0$$

Se encuentra que para cada valor de γ existe un valor de τ , τ_o , en el cual (6.54) dejar de tener solución acotada y que puede considerarse como una primera aproximación del instante en que tiene lugar la ignición. Las figuras 6.3 y 6.4 representan, respectivamente, los valores de $\psi_{o,\tau}(\infty, \tau)$ y $\psi_o(\infty, \tau)$ para distintos valores de γ . La primera permite identificar con claridad el instante τ_o aunque también se observa que el intervalo de tiempo asociado a la transición desde $\psi_{o,\tau} = \mathcal{O}(1)$ hasta $\psi_{o,\tau} \gg 1$ disminuye conforme aumenta γ . Esto hace que en la figura 6.4 la ignición sólo sea evidente si γ es relativamente pequeño. De hecho para valores de γ grandes ($\gamma \sim 15$) el intervalo de transición llega a ser tan pequeño que el esquema numérico carece de la resolución

necesaria para ponerlo de manifiesto. Inmediatamente surge la siguiente pregunta: ¿es el intervalo de transición tan pequeño que efectivamente el método numérico no lo detecta o, por el contrario, simplemente no existe tal transición ni, en consecuencia, ignición cuando γ es suficientemente grande? Sin duda ésta es una de las cuestiones cruciales que pueden plantearse en el contexto de este trabajo, motivada además por los resultados del análisis del modelo simplificado que se realizó previamente.

Para interpretar la situación que se presenta al descartar la existencia de ignición es útil considerar para cada γ el siguiente problema auxiliar:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}_o}{\partial \eta^2} + \lambda \frac{\tau_o}{2} y_o(\eta) e^{\tilde{\psi}_o - \eta} &= 0 \\ \tilde{\psi}_o(0, \lambda) = \tilde{\psi}_{o,\eta}(\infty, \lambda) &= 0 \end{aligned} \quad (6.55)$$

donde la función incógnita $\tilde{\psi}_o(\eta, \lambda)$ representa la distribución de temperatura que existiría en el tiempo $\tau = \lambda \tau_o$ si la concentración de reactante, $y_o(\eta)$, fuese independiente del tiempo e igual a $Y_o(\eta, \tau_o)$ solución de (6.50) en $\tau = \tau_o$, siendo τ_o el valor máximo de τ para el cual el método numérico es capaz de calcular una solución del problema (6.50), bien porque la derivada $\psi_{o,\tau}$ deja de estar acotada o por falta de resolución. Obsérvese que $\tilde{\psi}_o(\eta, 1) = \psi_o(\eta, \tau_o) = \theta_o(\eta)$.

Este problema auxiliar puede resolverse mediante el método descrito en el capítulo 3 que permite calcular con precisión el valor límite de λ , λ_{lim} , para el cual (6.55) admite solución. En $\lambda = \lambda_{lim}$ el problema

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}_{o,\lambda}}{\partial \eta^2} + \lambda \frac{\tau_o}{2} y_o(\eta) e^{\tilde{\psi}_{o,\lambda} - \eta} &= \frac{\tau_o}{2} y_o(\eta) e^{\tilde{\psi}_{o,\lambda} - \eta} \\ \tilde{\psi}_{o,\lambda}(0, \lambda) = (\tilde{\psi}_{o,\lambda})_\eta(\infty, \lambda) &= 0 \end{aligned} \quad (6.56)$$

carece de solución acotada y por lo tanto el problema

$$\frac{d^2 \phi}{d\eta^2} + \lambda_{lim} \frac{\tau_o}{2} y_o e^{\tilde{\psi}_{o,\lambda} - \eta} \phi = 0; \quad \phi(0) = \phi_\eta(\infty) = 0 \quad (6.57)$$

posee una autofunción no nula no verificándose la condición de resolubilidad correspondiente a (6.56), con lo cual:

$$\int_0^\infty -\frac{\tau_o}{2} y_o e^{\tilde{\psi}_{o,\lambda} - \eta} \phi \, d\eta \neq 0$$

Al calcular el valor de λ_{lim} se encontró $\lambda_{lim} = 1$ para todos los valores de γ , lo que indica que en $\tau = \tau_o$ existe una autofunción no nula del problema lineal

$$H[\theta] \equiv \frac{d^2\phi}{d\eta^2} + \frac{\tau_o}{2}y_o(\eta)e^{\theta_o(\eta)-\eta} = 0; \quad \phi(0) = \phi_\eta(\infty) = 0 \quad (6.58)$$

Si γ es de orden unidad, en cuyo caso la ignición se aprecia de manera evidente, el problema (6.54) no admite solución acotada y, por tanto, se verifica

$$\int_o^\infty -\frac{1}{2}e^{\theta_o-\eta}(\tau_o Y_{o,\tau}(\eta, \tau_o) + y_o(\eta))\phi d\eta \neq 0 \quad (6.59)$$

Consideremos ahora el rango de valores de γ en que deja de ser de orden unidad ($\gamma \sim 12$) en el cual, aparentemente al menos, el esquema numérico carece de resolución. Si suponemos que en τ_o no tiene lugar la ignición, el fallo del método numérico podría producirse a consecuencia de que $\partial\psi_o(\eta, \tau_o^-)/\partial\tau$ y $\partial\psi_o(\eta, \tau_o^+)/\partial\tau$ son finitos pero distintos, es decir, estaríamos ante un punto singular análogo al que se encuentra al analizar el modelo simplificado. Para describir adecuadamente la transición entre τ_o^- y τ_o^+ debe emplearse una escala de tiempos más pequeña en la cual los efectos no estacionarios, que ahora son fundamentales, sean de orden unidad. El análisis de esta capa límite con la hipótesis $\partial\psi_o(\eta, \tau_o^-)/\partial\tau$ finita, lo que implica que en τ_o^- se verifica la condición de resolubilidad para (6.54):

$$\int_o^\infty -\frac{1}{2}e^{\theta_o-\eta}(\tau_o Y_{o,\tau} + y_o)\phi d\eta = 0$$

muestra ser inconsistente. Por una parte la desviación de la temperatura respecto de $\theta_o(\eta)$ puede ponerse como $a(\sigma)\phi(\eta) + \sigma\tau_o\psi_{o,\tau}(\eta, \tau_o^-)$, donde σ es la variable temporal interior, encontrándose para la función $a(\sigma)$ una ecuación diferencial cuya única solución, que verifique la condición de contorno en $\sigma \rightarrow -\infty$, es la solución nula y, por otra, si $\partial\psi_o(\eta, \tau_o^-)/\partial\tau$ es finita al calcular la solución de las ecuaciones para ψ_1 e Y_1 cuando $\tau_o - \tau \ll 1$, necesario para realizar el "matching" con la capa límite, se obtiene un comportamiento que no está de acuerdo con los resultados numéricos. Por tanto parece que existe siempre la ignición en el caso $\gamma = \mathcal{O}(1)$ y que es conveniente realizar un análisis del caso $\gamma \gg 1$.

La figura (6.5) recoge los valores de τ_o y las temperaturas máximas obtenidas en función de γ . En las figuras (6.6) y (6.7) se han representado las distribuciones de concentración y temperatura para dos valores típicos de γ y distintos tiempos. Cuando γ es pequeño la ignición se produce antes de agotarse el combustible en la superficie

exterior, en cambio si γ es grande la concentración se hace exponencialmente pequeña en una zona próxima a la superficie, generándose una capa cuyo espesor es de orden unidad en la cual se produce la reacción y la variación de concentración desde cero a uno. Esta capa, que en el intervalo de tiempo previo a la ignición se propaga hacia el interior del sólido, presenta una estructura similar a un frente de reacción tanto más acusada cuanto mayor es γ . Las distribuciones de temperatura, muy semejantes en todos los casos, son tales que la derivada espacial en $\eta = 0$ es siempre, incluso en el instante de ignición, menor que la unidad, de forma que la temperatura real del sólido, $1 - \eta + \psi_o$, es inferior a la superficial y por tanto existe un flujo de calor desde el exterior hacia el sólido, a diferencia de lo que ocurre cuando se desprecia el consumo de reactante ($\gamma = 0$) en que la ignición ocurre, en primera aproximación, cuando el flujo de calor es nulo.

El problema (6.50) describe la etapa inicial en la cual los efectos no estacionarios son despreciables y que, evidentemente, corresponde a $\tau_o - \tau = \mathcal{O}(1)$. Cuando $\tau_o - \tau \ll 1$ la solución de (6.50) indica que $\partial\psi_o/\partial\tau \gg 1$ y por tanto el modelo cuasi-estacionario deja de ser aplicable. La solución en $\tau_o - \tau \ll 1$ debe obtenerse mediante el análisis de una etapa corta, que como antes denominaremos de transición, en la cual tiene lugar realmente el "runaway". La etapa inicial hay que considerarla como precursora de la ignición, apareciendo efectos incipientes cuando $\tau \rightarrow \tau_o$. La descripción precisa de tales efectos, necesaria para realizar el "matching" con la etapa de transición y determinar su escala, será realizada a continuación.

6.5.2.1. Soluciones de la etapa inicial cuando $\tau_o - \tau \ll 1$

El procedimiento que seguiremos es análogo al de 6.5.1.1 con la única diferencia de no disponer de expresiones analíticas para las funciones que intervienen.

Haciendo $\hat{\tau} = \tau_o - \tau > 0$ con $\hat{\tau} \ll 1$ la solución de (6.50a) se busca como

$$\psi_o(\eta, \hat{\tau}) = \theta_o(\eta) + \lambda_1(\hat{\tau})\theta_1(\eta) + \lambda_2(\hat{\tau})\theta_2(\eta) + \dots \quad (6.60)$$

Teniendo en cuenta que

$$Y_o(\eta, \hat{\tau}) = y_o(\eta) - \frac{\partial Y_o(\eta, \tau_o)}{\partial \tau} \hat{\tau} + \dots \quad (6.61)$$

se obtiene para θ_1 la siguiente ecuación

$$\begin{aligned} \mathbf{H}[\theta_1] &= \frac{\hat{\tau}}{\lambda_1} \frac{1}{2} (y_o + \tau_o Y_{o,\tau}) e^{\theta_o - \eta} + o(1) \\ \theta_1(0) &= \theta_{1,\eta}(\infty) = 0 \end{aligned} \quad (6.62)$$

Como consecuencia de (6.59) este problema admite solución solamente en el caso de que $\hat{\tau}/\lambda_1(\hat{\tau}) \rightarrow 0$ siendo ésta $\theta_1 = \phi$, donde ϕ es la autofunción solución de (6.58).

La ecuación para θ_2 es:

$$\begin{aligned} H[\theta_2] &= \frac{\hat{\tau}}{\lambda_2} \frac{1}{2} (y_o - \tau_o Y_{o,\tau}) e^{\theta_o - \eta} - \frac{\lambda_1^2}{\lambda_2} \frac{\tau_o}{4} y_o e^{\theta_o - \eta} \phi^2 + o(1) \\ \theta_2(0) &= \theta_{2,\eta}(\infty) = 0 \end{aligned} \quad (6.63)$$

y al imponer la condición de resolubilidad se obtiene:

$$\lambda_1(\hat{\tau}) = -a_1 \sqrt{\hat{\tau}} \quad (6.64)$$

siendo

$$a_1 = \left\{ 2 \frac{\int_o^\infty (y_o + \tau_o Y_{o,\tau}) e^{\theta_o - \eta} \phi \, d\eta}{\int_o^\infty \tau_o y_o e^{\theta_o - \eta} \phi^3 \, d\eta} \right\}^{1/2} \neq 0 \quad (6.65)$$

Por tanto para $0 < \tau_o - \tau \ll 1$ las expresiones de ψ_o e Y_o son:

$$\psi_o(\eta, \tau) = \psi_o(\eta, \tau_o) - a_1 \phi(\eta) \sqrt{\tau_o - \tau} + o((\tau_o - \tau)^{1/2}) \quad (6.66a)$$

$$Y_o(\eta, \tau) = Y_o(\eta, \tau_o) - \frac{\partial Y_o(\eta, \tau_o)}{\partial \tau} (\tau_o - \tau) + o(\tau_o - \tau) \quad (6.66b)$$

Las ecuaciones para los términos de orden ε en (6.23), $\psi_1 = \bar{\psi}_1 + \eta B_1(\tau)$ e Y_1 son

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2 \bar{\psi}_1}{\partial \eta^2} + \frac{\tau}{2} e^{\psi_o - \eta} [Y_o \bar{\psi}_1 + Y_1 - \alpha(\psi_o - \eta)^2 Y_o + \eta B_1(\tau) Y_o] &= 0 \\ \bar{\psi}_1(0, \eta) = \bar{\psi}_{1,\eta}(\infty, \tau) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (6.67a)$$

$$\left. \begin{aligned} \tau \frac{\partial Y_1}{\partial \tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y_1}{\partial \eta} + \gamma \frac{\tau}{2} e^{\psi_o - \eta} [Y_o \bar{\psi}_1 + Y_1 - \alpha(\psi_o - \eta)^2 Y_o + \eta B_1(\tau) Y_o] &= 0 \\ Y_1(\eta, 0) = Y_1(\infty, \tau) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (6.67b)$$

siendo

$$B_1(\tau) = -\sqrt{\tau} \int_o^\tau \frac{d\psi_o(\infty, \tau')}{d\tau'} \frac{d\tau'}{\sqrt{\tau - \tau'}} \quad (6.67c)$$

Para obtener el comportamiento de ψ_1 e Y_1 cuando $\tau_o - \tau \ll 1$ es necesario conocer, además de las expresiones anteriores para ψ_o e Y_o , una expresión para la función $B_1(\tau)$.

En la variable $\hat{\tau}$ (6.67c) es:

$$B_1(\hat{\tau}) = -\sqrt{\tau_o - \hat{\tau}} \int_o^{\tau_o - \hat{\tau}} \frac{d\psi_o(\infty, \tau')}{d\tau'} \frac{d\tau'}{\sqrt{\tau_o - \hat{\tau} - \tau'}}$$

Tomando k tal que $\hat{\tau} \ll k \ll 1$ la integral anterior puede descomponerse como $I_1 + I_2$ siendo I_1 la correspondiente al intervalo $[0, \tau_o - k]$ e I_2 la correspondiente a $[\tau_o - k, \tau_o - \hat{\tau}]$. I_1 representa la contribución de la etapa inicial antes de que aparezcan los efectos incipientes de la ignición y en ella $d\psi_o(\infty, \tau')/d\tau'$ es de orden unidad de manera que puede calcularse a partir de la solución de (6.50a). Por el contrario I_2 , donde $\tau_o - \tau' \ll 1$, está asociada a estos efectos y se calcula mediante (6.66a). Cuando $\tau' \rightarrow \tau_o$, $\partial\psi_o(\infty, \tau')/\partial\tau' \sim 1/\sqrt{\tau' - \tau_o}$ lo que se traduce en que la integral presenta una divergencia logarítmica cuyo tratamiento es similar al del caso $\gamma \ll 1$. Haciendo $\hat{t} = \tau_o - \tau'$ se tiene

$$I_2 = \int_{\hat{\tau}}^k \frac{d\psi_o(\infty, \tau_o - \hat{t})}{d\hat{t}} \frac{d\hat{t}}{\sqrt{\hat{t} - \hat{\tau}}}$$

Teniendo en cuenta que $\int d\hat{t} / (2\sqrt{\hat{t}}\sqrt{\hat{t} - \hat{\tau}}) = \ln [\sqrt{\hat{t}} + \sqrt{\hat{t} - \hat{\tau}}]$, se obtiene para $B_1(\hat{\tau})$:

$$B_1(\hat{\tau}) = -\sqrt{\tau_o - \hat{\tau}} \left[I_1 + a_1 \ln \sqrt{\hat{\tau}} - a_1 \ln (2\sqrt{k}) + \mathcal{O}(\hat{\tau}) \right]$$

Como B_1 no puede depender de k , el término $\ln 2\sqrt{k}$ debe compensarse con I_1 con lo que finalmente

$$B_1(\tau) = -a_2 + a_1 \sqrt{\tau_o} \ln \sqrt{\tau_o - \tau} + \mathcal{O}(\tau_o - \tau) \quad (6.68)$$

donde a_2 es una constante positiva de orden unidad que hay que determinar numéricamente para cada valor de γ .

La solución para $\bar{\psi}_1$ e Y_1 cuando $\tau_o - \tau \ll 1$ se busca como

$$\bar{\psi}_1(\eta, \hat{\tau}) = \nu_1(\hat{\tau})\varphi_1(\eta) + \nu_2(\hat{\tau})\varphi_2(\eta) + \dots$$

$$Y_1(\eta, \hat{\tau}) = \rho_1(\hat{\tau})Y_{11}(\eta) + \rho_2(\hat{\tau})Y_{12}(\eta) + \dots$$

Para φ_1 se obtiene la ecuación

$$\mathbf{H}[\varphi_1] = -\frac{\rho_1}{\nu_1} \frac{\tau_o}{2} e^{\theta_o - \eta} Y_{11} - \frac{1}{\nu_1} \frac{\tau_o}{2} \left[-\alpha(\theta_o - \eta)^2 y_o + \eta y_o \left(\sqrt{\tau_o} a_1 \ln \sqrt{\hat{\tau}} - a_2 \right) \right] e^{\theta_o - \eta}$$

$$\varphi_1(0) = \varphi_{1,\eta}(\infty) = 0$$

Teniendo en cuenta que Y_{11} es negativa, el integrando en la condición de resolubilidad es de signo constante y, por tanto, ésta se verificará solamente si $\rho_1/\nu_1 \rightarrow 0$ y $1/\nu_1 \rightarrow 0$.

Tomando $\varphi_1 = \phi$, la ecuación para Y_{11} es:

$$-\tau_o Y_{11} \frac{d\rho_1}{d\hat{\tau}} + \gamma \frac{\tau_o}{2} e^{\theta_o - \eta} y_o \phi(\eta) \nu_1 + \mathcal{O}(1) = 0$$

de donde se deduce

$$Y_{11} = -\frac{\gamma}{2} y_o \phi e^{\theta_o - \eta}$$

$$\frac{d\rho_1}{d\hat{\tau}} = -\nu_1(\tau)$$

Integrando esta última ecuación

$$\rho_1(\hat{\tau}) = \rho_1(k) + \int_{\hat{\tau}}^k \nu_1(\hat{\tau}) d\hat{\tau}$$

donde k es tal que $\hat{\tau} \ll k \ll 1$ y debe elegirse de manera que se verifique la siguiente condición de acoplamiento

$$Y_1(\eta, \tau_o - k) = -\frac{\gamma}{2} e^{\theta_o - \eta} \phi y_o \rho_1(k)$$

con $\rho_1(k) = \mathcal{O}(1)$.

La ecuación para φ_2 es

$$\begin{aligned} \mathbf{H}[\varphi_2] = & -\frac{\rho_1}{\nu_2} \frac{\tau_o}{2} e^{\theta_o - \eta} Y_{11} + \frac{\nu_1 \sqrt{\hat{\tau}}}{\nu_2} \frac{\tau_o}{2} y_o e^{\theta_o - \eta} a_1 \phi^2 + \\ & \frac{1}{\nu_2} \frac{\tau_o}{2} e^{\theta_o - \eta} \left[+\alpha(\theta_o - \eta)^2 + \eta a_2 - \eta a_1 \sqrt{\tau_o} \ln \sqrt{\hat{\tau}} \right] \end{aligned}$$

y aplicando la condición de resolubilidad se obtiene $\nu_2 = 1$ y una ecuación integral lineal para ν_1 cuya solución puede escribirse como:

$$\nu_1(\hat{\tau}) = \frac{m}{\sqrt{\hat{\tau}}} \ln \sqrt{\hat{\tau}} - \frac{n}{\sqrt{\hat{\tau}}} + \mathcal{O}(1)$$

siendo m y n constantes positivas de orden unidad.

Por tanto el comportamiento de $\psi_1(\eta, \tau)$ cuando $\tau_o - \tau \ll 1$ es de la forma:

$$\psi_1(\eta, \tau) = \left(m \frac{\ln \sqrt{\tau_o - \tau}}{\sqrt{\tau_o - \tau}} - \frac{n}{\sqrt{\tau_o - \tau}} \right) \phi(\eta) + \dots$$

De este resultado junto con (6.66a) se obtiene, análogamente al caso $\gamma \ll 1$, que en la etapa de transición es $\tau_o - \tau = \mathcal{O}(\varepsilon)$.

6.5.2.2. Solución en la etapa de transición

La estructura de las soluciones calculadas anteriormente cuando se supone que $\tau_o - \tau = o(1)$ determina el uso de las siguientes variables en la etapa de transición:

$$\begin{aligned} D &= 1 + \delta(\varepsilon) \\ \tau &= \tau_o + \varepsilon\sigma \\ \psi(\eta, \sigma) &= \theta_o(\eta) + \sqrt{\varepsilon}\theta_1(\eta, \sigma) + \varepsilon\theta_2(\eta, \sigma) + \dots \\ Y(\eta, \sigma) &= y_o(\eta) + \varepsilon y_1(\eta, \sigma) + \dots \end{aligned} \tag{6.69}$$

que son las mismas que se definieron en (6.40). De nuevo $\delta(\varepsilon)$ es una función tal que $\delta(\varepsilon) = o(\varepsilon)$ y que debe determinarse con la condición de que la ignición tenga lugar en $\tau = \tau_o$, es decir en $\sigma = 0$.

A partir de las ecuaciones (6.14) se obtiene el siguiente problema para θ_1 :

$$\begin{aligned} H[\theta_1] &= -\frac{\delta}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\tau_o}{2} y_o e^{\theta_o - \eta} + o(1) \\ \theta_1(0, \sigma) &= \theta_{1,\sigma}(\infty, \sigma) = 0 \end{aligned} \tag{6.70}$$

La condición de resolubilidad muestra que $\delta = o(\sqrt{\varepsilon})$ y que, por tanto, $\theta_1(\eta, \sigma) = A_1(\sigma)\phi(\eta)$. La función $A_1(\sigma)$ debe calcularse posteriormente y para que las soluciones en ambas etapas acoplen tiene que verificar $A_1(\sigma) \sim -a_1\sqrt{-\sigma}$ cuando $\sigma \rightarrow -\infty$, donde la constante a_1 está determinada por (6.65).

Para y_1 se obtiene la ecuación

$$\tau_o \frac{\partial y_1}{\partial \sigma} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial y_o}{\partial \eta} + \gamma \frac{\tau_o}{2} y_o e^{\theta_o - \eta} = 0 \tag{6.71}$$

cuya solución, teniendo en cuenta (6.50b) y (6.61), es:

$$y_1(\eta, \sigma) = \frac{\partial Y_o(\eta, \tau_o)}{\partial \tau} \sigma \tag{6.72}$$

Finalmente la ecuación para θ_2 es:

$$\begin{aligned} H[\theta_2] &= -\frac{\tau_o}{2} \frac{\delta}{\varepsilon} y_o e^{\theta_o - \eta} - \\ &\quad \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} \left[\sigma y_o + \tau_o Y_{o,\tau} \sigma - \tau_o y_o \alpha(\theta_o - \eta)^2 + \frac{1}{2} \tau_o y_o A_1^2 \phi^2 \right] \end{aligned} \tag{6.73a}$$

cuyas condiciones de contorno son:

$$\theta_2(0, \sigma) = 0$$

$$\theta_{2,\eta}(\infty, \sigma) = -\sqrt{\tau_o + \varepsilon\sigma} \int_o^{\tau_o + \varepsilon\sigma} \frac{d\psi(\infty, \tau')}{d\tau'} \frac{d\tau'}{\sqrt{\tau_o + \varepsilon\sigma - \tau'}} \quad (6.73b)$$

Procediendo de manera análoga al caso $\gamma \ll 1$ esta condición de contorno en $\eta \rightarrow \infty$ puede expresarse salvo términos de orden δ y $\sqrt{\varepsilon}$, como:

$$\theta_{2,\eta}(\infty, \sigma) = \frac{\sqrt{\tau_o} a_1}{2} \ln(-\varepsilon\sigma) - a_2 - \sqrt{\tau_o} a_1 2 \int_{-k}^{\sigma} \left(\frac{2}{a_1} \frac{dA_1(\sigma')}{d\sigma'} - \frac{1}{\sqrt{\sigma'}} \right) \frac{d\sigma'}{\sqrt{\tau - \tau'}} \quad (6.74)$$

Mediante el cambio $\theta_2(\eta, \sigma) = \bar{\theta}_2(\eta, \sigma) + \eta\theta_{2,\eta}(\infty, \sigma)$ la ecuación (6.73a) se transforma en:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}[\bar{\theta}_2] = & -\frac{\tau_o}{2} \frac{\delta}{\varepsilon} y_o e^{\theta_o - \eta} - \frac{1}{2} e^{\theta_o - \eta} \left[(y_o + \tau_o Y_{o,\tau}) \sigma + \right. \\ & \left. \tau_o y_o (\theta_{2,\eta}(\infty, \sigma) \eta - \alpha(\theta_o - \eta)^2) + \frac{1}{2} \tau_o y_o A_1^2 \phi^2 \right] \end{aligned} \quad (6.75a)$$

$$\bar{\theta}_2(0, \sigma) = \bar{\theta}_{2,\eta}(\infty, \sigma) = 0 \quad (6.75b)$$

Al imponer la condición de resolubilidad se obtiene:

$$\begin{aligned} -a_3 + a_5 \frac{\delta}{\varepsilon} + \sigma \frac{a_1^2}{2} + \frac{A_1^2(\sigma)}{2} + \\ \frac{a_1 a_4}{2} \left[\ln \varepsilon + \ln(-\sigma) - \int_{-k}^{\sigma} \left(\frac{2}{a_1} \frac{dA_1}{d\sigma'} - \frac{1}{\sqrt{-\sigma'}} \right) \frac{d\sigma'}{\sqrt{\sigma - \sigma'}} \right] = 0 \end{aligned} \quad (6.76)$$

donde $1 \ll k \ll 1/\varepsilon$. Las constantes a_1 y a_2 son las determinadas con anterioridad y las restantes están definidas por las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} a_3 &= \frac{\int_o^\infty y_o e^{\theta_o - \eta} [\alpha(\theta_o - \eta)^2 + a_2 \eta] \phi d\eta}{\int_o^\infty y_o e^{\theta_o - \eta} \phi^3 d\eta} \\ a_4 &= \sqrt{\tau_o} \frac{\int_o^\infty y_o e^{\theta_o - \eta} \eta \phi d\eta}{\int_o^\infty y_o e^{\theta_o - \eta} \phi^3 d\eta} \\ a_5 &= \frac{\int_o^\infty y_o e^{\theta_o - \eta} \phi d\eta}{\int_o^\infty y_o e^{\theta_o - \eta} \phi^3 d\eta} \end{aligned} \quad (6.77)$$

De (6.76) deducimos

$$\delta = \frac{a_1 a_4}{2a_5} \varepsilon \ln \varepsilon^{-1} + \frac{a_3}{a_5} \varepsilon + \frac{c}{2a_5} \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon \sqrt{\varepsilon}) \quad (6.78)$$

siendo c una constante de orden unidad.

De igual manera que en el caso $\gamma \ll 1$, δ representa el incremento del tiempo de ignición en la escala del tiempo químico. Es posible identificar tres componentes en δ . El término proporcional a $\varepsilon \ln \varepsilon^{-1}$ está asociado al incremento debido a la pérdida de calor consecuencia de los efectos incipientes de ignición durante la etapa inicial. El resto de la pérdida de calor, es decir la que existe durante la primera parte de la etapa inicial en la cual $\partial \psi_o(\infty, \tau)/\partial \tau$ es de orden unidad, es responsable del término $a_3 \varepsilon/a_5$. Finalmente $c\varepsilon/a_5$ representa la duración de la etapa de transición. Obsérvese que hasta el orden en que se ha calculado δ no interviene la pérdida de calor asociada al aumento de entalpía local, que en la etapa inicial es de orden ε^2 y cuya contribución a δ sería de orden $\varepsilon^{3/2}$.

La ecuación para $A_1(\sigma)$ queda en la forma:

$$A_1^2 + a_1^2 \sigma + a_1 a_4 \ln(-\sigma) + c = a_1 a_4 \int_{-k}^{\sigma} \left(\frac{2}{a_1} \frac{dA_1}{d\sigma'} - \frac{1}{\sqrt{-\sigma'}} \right) \frac{d\sigma'}{\sqrt{\sigma - \sigma'}} \quad (6.79)$$

que mediante los cambios:

$$A_1 = \sqrt{\frac{a_1 a_4}{2}} g, \quad (\sigma, \sigma') = \frac{a_4}{2a_1} (y, y')$$

y con $b = 2c/a_1 a_4 + 2\ln(a_4/2a_1)$ se reduce a la forma canónica:

$$\int_{-\infty}^y \left(4 \frac{dg}{dy'} - \frac{2}{\sqrt{-y'}} \right) \frac{dy'}{\sqrt{\sigma - \sigma'}} = y + g^2 + 2\ln(-y) + b$$

verificándose $g \sim -\sqrt{-y}$ cuando $y \rightarrow -\infty$, que es la misma ecuación encontrada en el análisis $\gamma \ll 1$.

Si definimos

$$\begin{aligned} a_6 &= \sqrt{a_1 a_4/2} \\ a_7 &= a_4/2a_1 \\ a_8 &= a_6^2/a_5 \\ a_9 &= a_3/a_5 + a_8(b - 2\ln a_7)/2 \end{aligned} \quad (6.80)$$

A_1 , σ y δ pueden expresarse mediante

$$\begin{aligned} A_1 &= a_6 g \\ \sigma &= a_7 y \\ \delta &= a_8 \varepsilon \ln(1/\varepsilon) + a_9 \varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^{3/2}) \end{aligned} \quad (6.81)$$

La figura 6.8 muestra la variación de los coeficientes a_1 , a_2 , a_3 , a_4 y a_5 en función de γ . El coeficiente a_1 , relacionado con la curvatura de $\psi_o(\infty, \tau)$ cerca de τ_o , es decreciente con γ como consecuencia de que la transición entre $\psi_{o,\tau} = \mathcal{O}(1)$ y $\psi_{o,\tau} \gg 1$ tiene lugar en intervalos de τ cada vez más pequeños. Los coeficientes a_3 y a_4 crecen de manera aproximadamente lineal con γ debido a que la región donde $y_o e^{\theta_o - \eta}$ no es nulo, es decir la zona de reacción, corresponde a valores de η crecientes y en (6.77a) y (6.77b) el integrando tiene a η como factor. Los demás coeficientes a_2 y a_5 se mantienen de orden unidad.

Los coeficientes a_6 y a_7 , representados en la figura 6.9, representan los factores por los que hay que multiplicar las variables canónicas g y y para obtener $A_1(\sigma)$ y σ . Al ser a_6 decreciente y a_7 creciente la amplitud de la función $A_1(\sigma)$ es cada vez más pequeña mientras que la región en la cual se produce la divergencia es cada vez más grande dando lugar a que la variación de temperatura en la etapa de transición es más suave conforme aumenta γ .

Finalmente los coeficientes a_8 y a_9 determinan la corrección que debe aplicarse a τ_o para obtener el tiempo de ignición. Empleando como antes el tiempo químico $c_p(RT_s^2/E)/qBe^{-E/RT_s}$ como tiempo característico, la variable temporal es $\hat{t} = D\tau/2\pi\epsilon^2$ en la cual la ignición ocurre cuando

$$\hat{t}_{ig} = \frac{\tau_o}{2\pi\epsilon^2} \left(1 + a_8\epsilon \ln\epsilon^{-1} + a_9\epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^{3/2}) \right) \quad (6.82)$$

De la variación de a_8 y a_9 se deduce que la corrección asociada a la divergencia logarítmica a través del término $\epsilon \ln\epsilon^{-1}$ pierde importancia al aumentar γ a consecuencia de que los efectos incipientes de la ignición durante la etapa inicial, responsables de esta divergencia, van desapareciendo. Al mismo tiempo la corrección debida a la pérdida de calor durante el intervalo en el cual $\partial\psi_o(\infty, \tau)/\partial\tau$ es de orden unidad aumenta. Además a causa de que a_7 crece con γ la duración de la etapa de transición aumenta y la suma de estos dos últimos efectos explica que a_9 sea creciente.

Evidentemente este análisis falla cuando γ es suficientemente grande y a_9 es de orden $1/\epsilon$ pues entonces no se verifica $\delta = o(\epsilon)$. La etapa de transición no es corta comparada con la etapa inicial pues $a_7 \gg 1$ y en consecuencia no puede describirse mediante (6.69).

6.5.3. Análisis cuando $\gamma \gg 1$

Analizaremos a continuación la solución de (6.14) cuando es $\gamma \gg 1$. El objetivo principal es determinar si existe algún valor crítico de γ tal que para valores mayores deja de producirse la ignición. Se trata, por tanto, de comprobar si las conclusiones que se obtuvieron al analizar el modelo simplificado son aplicables al modelo completo.

La solución se busca como un desarrollo en serie de potencias cuya forma depende del orden de magnitud relativo entre γ y ε . Consideraremos, de manera análoga al apartado 6.5.1, el límite distinguido $\gamma = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$, que corresponde a valores de $\Gamma_c = \pi\varepsilon^2\gamma$ pequeños frente a la unidad.

Sea $\gamma = \Gamma/\varepsilon$ con $\Gamma = \alpha c_p T_s / \pi q$ de orden unidad, tomando como nueva variable temporal $t = \tau/\varepsilon$ y con los desarrollos para ψ e Y dados por (6.23) y (6.24) se obtienen de (6.14) las siguientes ecuaciones, condiciones de contorno e iniciales:

$$\frac{\partial^2 \psi_o}{\partial \eta^2} = 0; \quad \psi_o(0, t) = \psi_{o,\eta}(\infty, t) = 0 \quad (6.84a)$$

$$t \frac{\partial Y_o}{\partial t} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y_o}{\partial \eta} + \Gamma \frac{t}{2} Y_o e^{-\eta} = 0; \quad Y_o(\eta, 0) = Y_o(\infty, t) = 1 \quad (6.84b)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \eta^2} + \frac{t}{2} Y_o e^{-\eta} = 0; \quad \psi_1(0, t) = \psi_{1,\eta}(\infty, t) = 0 \quad (6.84c)$$

La solución de (6.84a), $\psi_o \equiv 0$, muestra que cuando $\gamma \gg 1$ la temperatura es de orden $1/\gamma$, lo que permite linealizar el término de Frank-Kamenetskii e^ψ . Sin este factor, que es el que produce la ignición, las ecuaciones anteriores admiten solución para todo valor de t .

La ecuación (6.84b) puede escribirse en las variables $\xi = \eta\sqrt{t}$ y t como:

$$\frac{\partial Y_o}{\partial t} = -\Gamma \frac{1}{2} Y_o e^{-\xi/\sqrt{t}}; \quad Y_o(\xi, 0) = 1$$

que integrada da

$$Y_o = \exp[-t\Gamma E_3(\eta)] \quad (6.85)$$

Con esta expresión el problema para ψ_1 es:

$$-\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \eta^2} = \frac{t}{2} \exp[-t\Gamma E_3(\eta) - \eta]; \quad \psi_1(0, t) = \psi_{1,\eta}(\infty, t) = 0 \quad (6.86)$$

que tiene que resolverse numéricamente. Para valores de t pequeños puede despreciarse $\Gamma t E_3(\eta)$ frente a η y se obtiene $\psi_1(\eta, t \ll 1) = t(1 - e^{-\eta})/2$.

Las figuras 6.10 a 6.14 muestran los perfiles de concentración y temperatura, el valor máximo de ψ_1 , la derivada temporal $\partial\psi_1(\infty, t)/\partial t$ y la función $B(t) = -\sqrt{t} \int_0^t \frac{d\psi_1(\infty, t')}{dt'} \frac{dt'}{\sqrt{t-t'}}$ que se obtienen al integrar las ecuaciones anteriores en los casos $\Gamma = 1$ y $\Gamma = 5$.

A consecuencia de la linealización de e^ψ la velocidad de reacción es independiente del incremento de temperatura de manera que la reacción puede considerarse localmente isoterma. Para tiempos moderadamente grandes frente a la unidad se forma un frente de reacción que separa la región donde existe equilibrio químico por haberse consumido el reactante de la región en la cual la reacción está congelada por efecto de la temperatura inerte. Este frente está situado en torno a η_f tal que $\Gamma t E_3(\eta_f) \sim 1$ y se propaga a una velocidad $\dot{\eta}_f \sim 1/t$.

Los resultados de este modelo son válidos mientras ψ_1 se mantenga de orden unidad. Si ψ_1 es una función creciente del tiempo y llega a ser de orden $1/\varepsilon$, la reacción deja de ser localmente isoterma y pasa a estar gobernada por una cinética tipo Frank-Kamenetskii a través del término e^ψ . Para analizar si ψ_1 es creciente con t considérese el siguiente problema:

$$-\frac{\partial^2 \psi_{1,t}}{\partial \eta^2} = \frac{1}{2} (1 - t\Gamma E_3(\eta)) \exp[-t\Gamma E_3(\eta) - \eta]$$

$$\psi_{1,t}(0, t) = (\psi_{1,t})_\eta(\infty, t) = 0$$

cuya solución es la derivada temporal de ψ_1 . Integrando una vez entre η e ∞ se obtiene:

$$\frac{\partial \psi_{1,t}}{\partial \eta} = \frac{1}{2} \int_\eta^\infty (1 - t\Gamma E_3(\eta')) \exp[-t\Gamma E_3(\eta') - \eta'] d\eta'$$

Teniendo en cuenta que para todo η es $E_3(\eta) < E_2(\eta)$ se tiene

$$\frac{\partial \psi_{1,t}}{\partial \eta} > \frac{1}{2} \int_\eta^\infty (1 - t\Gamma E_2(\eta')) \exp[-t\Gamma E_3(\eta') - \eta'] d\eta' = \frac{1}{2} \exp[-t\Gamma E_3(\eta) - \eta] > 0$$

es decir, $\psi_{1,t}$ es una función creciente de η cuyo valor máximo es $\psi_{1,t}(\infty, t)$. Si se integra de nuevo entre 0 y η se obtiene

$$\psi_{1,t}(\eta, t) = \frac{1}{2} \int_0^\eta d\eta' \int_{\eta'}^\infty (1 - \Gamma t E_3(\eta'')) \exp[-t\Gamma E_3(\eta'') - \eta''] d\eta'' >$$

$$\frac{1}{2} \int_0^\eta \exp[-t\Gamma E_3(\eta') - \eta'] d\eta' > 0$$

Por tanto ψ_1 es una función creciente existiendo un valor de t a partir del cual no es correcto linealizar el término e^ψ dando lugar a una segunda etapa, análoga a la de transición en el caso $\gamma = \mathcal{O}(1)$, caracterizada por que la cinética de la reacción vuelve de nuevo a ser de tipo Frank-Kamenetskii. En consecuencia la velocidad de reacción aumenta, liberándose calor a un ritmo mayor que cuando la reacción era isoterma lo que podría originar la ignición al cabo de un cierto tiempo. Esta situación sería análoga a la encontrada por Kassoy y Liñán [KL] al analizar la explosión térmica en un sistema supercrítico no adiabático cuyas pérdidas de calor son muy próximas a las críticas. En este sistema durante un período de tiempo largo el calor liberado por la reacción es casi compensado por las pérdidas del mismo originando un aumento de la temperatura muy gradual pero que finalmente es capaz de producir la ignición.

De los resultados anteriores parece deducirse que la ignición se produce para todo valor de Γ de orden unidad y que el consumo de reactante retrasa la ignición pudiendo incluso modificar el orden de magnitud del tiempo de ignición, ya que el tiempo característico que hemos empleado para adimensionalizar las ecuaciones es el tiempo de ignición que se obtiene cuando se desprecian los efectos del consumo de reactante, mientras que ahora éstos son importantes. Si el tiempo de ignición fuese muy grande podría ser necesario que la condición de contorno en $\eta = \infty$ permitiese la pérdida de calor hacia la región inerte, originada por el efecto acumulativo de la derivada temporal de la temperatura. En la etapa de transición, analizada anteriormente, este efecto llega a ser de orden unidad gracias a los efectos incipientes de ignición que se producen al finalizar la etapa inicial. Cuando $\gamma \gg 1$ la etapa isoterma carece de éstos pero a causa de su mayor duración el efecto acumulativo puede llegar a ser también de orden unidad en cuyo caso no debe imponerse la condición $\psi_{o,\eta}(\infty, \tau) = 0$.

En todo caso obsérvese que $\Gamma = \mathcal{O}(1)$ es equivalente a $\Gamma_c = \mathcal{O}(\varepsilon)$, es decir, el parámetro que mide la importancia de los efectos de consumo de reactante en la explosión térmica es pequeño. Esto significa que si se alcanzasen las condiciones necesarias para una explosión térmica homogénea ésta se produciría. Si por el contrario fuese $\Gamma = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$ sería $\Gamma_c = \mathcal{O}(1)$ en cuyo caso la criticalidad desde el punto de vista de la explosión térmica desaparece, siendo más dudoso que pueda producirse la ignición en condiciones no homogéneas.

6.6.- ANÁLISIS DEL MODELO BIDIMENSIONAL

La solución del problema (6.18) se busca como un desarrollo en potencias de ε de la forma

$$\psi = \psi_o + \varepsilon\psi_1 + \varepsilon^2\psi_2 + \dots$$

$$Y = Y_o + \varepsilon Y_1 + \varepsilon^2 Y_2 + \dots$$

Teniendo en cuenta que el desarrollo de la función

$$\varphi_i = 1 - \operatorname{erf}(\sqrt{\pi\varepsilon}\xi \cos \theta/2) \operatorname{erf}(\sqrt{\pi\varepsilon}\xi \operatorname{sen}\theta/2) \quad (6.87)$$

es

$$\varphi_i = 1 - \varepsilon \frac{1}{2} \xi^2 \operatorname{sen} 2\theta + \varepsilon^2 \frac{\pi}{24} \xi^4 \operatorname{sen} 2\theta + o(\varepsilon^2)$$

se obtienen los siguientes problemas para ψ_o e Y_o :

$$\Delta\psi_o + D\tau Y_o \exp\left[\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \operatorname{sen} 2\theta\right] = 0 \quad (6.88a)$$

$$\psi_o(\xi, 0, \tau) = \psi_{o,\theta}(\xi, \pi/4, \tau) = \psi_{o,\xi}(\infty, \theta, \tau) = 0 \quad (6.88b)$$

$$\tau \frac{\partial Y_o}{\partial \tau} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial Y_o}{\partial \xi} + \Gamma D\tau Y_o \exp\left[\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \operatorname{sen} 2\theta\right] = 0 \quad (6.89a)$$

$$Y_o(\xi, \theta, 0) - 1 = Y_o(\infty, \theta, \tau) - 1 = 0 \quad (6.89b)$$

Si el parámetro Γ , relacionado con el unidimensional mediante $\Gamma = \gamma\varepsilon$ y con el homogéneo mediante $\Gamma = \Gamma_c/\pi\varepsilon$, es de orden ε ($\gamma = \mathcal{O}(1)$) las ecuaciones para la concentración y la temperatura se desacoplan al igual que ocurría en el caso unidimensional con $\gamma \ll 1$. La ecuación para Y_o proporciona $Y_o = 1$ con lo cual el problema para ψ_o se reduce al resuelto en el capítulo 3 cuando $\gamma = 0$. Esto significa que tanto el incremento de temperatura debido a la reacción como la cantidad de reactante consumida es de orden ε . En esta hipótesis, que es la analizada usualmente, la ignición se produce con una variación de concentración prácticamente nula y el tiempo de ignición es $\tau = 1$. Este puede corregirse al tener en cuenta los efectos no estacionarios y el efecto del consumo de reactante. Mientras los primeros introducen una corrección proporcional a $\varepsilon^{2/3}$, la asociada al segundo es de orden ε .

El método para resolver las ecuaciones (6.88) y (6.89) cuando $\Gamma = \mathcal{O}(1)$ se describe en el apéndice 6.3. De manera muy general puede señalarse que la ecuación

para la temperatura se resuelve mediante un procedimiento muy similar al desarrollado en el capítulo 3, lo que supone trasladar adecuadamente la condición de contorno en $\xi = \infty$. La concentración se calcula de forma análoga al caso unidimensional según lo reseñado en el apéndice 6.2.

Las figuras (6.15) y (6.16) muestran los valores máximos de $\psi_{o,\tau}$ y ψ_o para distintos valores de Γ , y las figuras (6.17) y (6.18) los perfiles de temperatura y concentración para $\Gamma = 0.2$ y $\Gamma = 0.5$. La ignición se produce si $\Gamma \lesssim 0.5$ en tiempos que como máximo son del orden de dos veces el correspondiente a $\Gamma = 0$. Si $\Gamma > 0.5$ aparecen dificultades al resolver el sistema de ecuaciones lineales generado por la discretización de la ecuación 6.88a y que son producto del mal condicionamiento de la matriz. A consecuencia de las mismas no es posible proseguir la integración a partir de un cierto valor de τ , τ_o , aún siendo $\psi_{o,\tau}$ finita. Al igual que en el caso unidimensional el análisis de la posible existencia de una capa límite en τ_o con derivadas finitas pero distintas a ambos lados es inconsistente.

Una posible explicación de esta situación puede ser la siguiente. Al aumentar Γ se consume el reactante de la superficie sin que se haya producido la ignición. Esto origina la aparición de un frente de reacción que se desplaza hacia el interior del sólido a una velocidad que es creciente con la velocidad de reacción y que, por tanto, depende de la temperatura a la que encuentra el reactante. Al haber eliminado la difusión del reactante, éste sólo puede calentarse por efecto de la temperatura inerte (el calentamiento producido por conducción a consecuencia del incremento de temperatura en la zona de reacción es pequeño), y debido a que ésta decae como ξ^2 la reacción se congela en una zona relativamente próxima al origen. Si el frente alcanza esta región sin que haya tenido lugar la ignición su velocidad se reduce cesando la propagación del mismo, de manera que en los instantes posteriores la concentración sería independiente del tiempo. Sin embargo la evolución no puede describirse mediante las ecuaciones (6.88) y (6.89) pues éstas no admiten una solución de la forma $Y_o = Y_o(\xi, \theta)$ ya que para que se verificase (6.89a) debería ser τe^{ψ_o} independiente de τ , es decir, $\psi_o(\xi, \theta, \tau) = \varphi_o(\xi, \theta) - \ln \tau$ no verificándose entonces el problema (6.88) para ψ_o . Parece razonable concluir que los problemas (6.88) y (6.89) carecen de solución si τ excede un cierto valor τ_o aunque $\psi_{o,\tau}$ sea finita. Esto pudiera ser consecuencia de que la simplificación introducida al reemplazar la temperatura inerte (6.87) por el primer término del desarrollo no es correcta pues la temperatura disminuye más rápidamente que en la expresión completa,

dando lugar a que la reacción se congele muy cerca de la superficie. Los experimentos numéricos realizados reteniendo todos los términos de (6.87) no han confirmado esta hipótesis ya que se observan dificultades análogas.

El mecanismo anterior para explicar cómo el frente de reacción se detiene al encontrar reactante frío es muy similar al expuesto por Williams [WI, pp. 328-335] al tratar de la inestabilidad intrínseca de la propagación de llamas originadas por la combustión en fase condensada de sólidos no reactivos. Esta inestabilidad se traduce en un modo de propagación pulsante correspondiendo los instantes de mayor velocidad a la reacción en zonas calientes, mientras que las de menor velocidad corresponden a zonas frías en las que el frente de reacción debe "esperar" a que la conducción de calor eleve la temperatura del combustible situado delante para acelerarse de nuevo. Un análisis más detallado ha sido realizado por Matkowsky y Sivashinsky [MS] quienes han determinado el valor de Γ_c de orden unidad en el cual se produce la pérdida de estabilidad.

Puede darse otra interpretación, que desde el punto de vista del problema que estamos tratando es más apropiada, si se considera la relación entre las velocidades de propagación del frente de reacción y de la onda térmica generada por el aumento de temperatura superficial. Obsérvese, en primer lugar, que en las variables previas a las de semejanza ésta es proporcional a $1/\sqrt{\tau}$ y, por tanto, decreciente. La velocidad del frente es mayor, pues de lo contrario en la variable de semejanza estaría fijo, con lo cual adelanta a la onda de conducción encontrándose con reactante a baja temperatura y reduciendo su velocidad hasta que el mismo es adelantado por la onda térmica que calienta nuevas capas de reactante haciendo que aumente su velocidad. Este proceso es básicamente no estacionario, incluso en la variable de semejanza, y por tanto no puede describirse sin retener los efectos no estacionarios. En consecuencia las dificultades anteriores pueden considerarse como un fallo de la hipótesis cuasiestacionaria. Obsérvese además que el término $\varepsilon\tau\partial\psi/\partial\tau$ debe tenerse en cuenta si es $\tau = \mathcal{O}(1)$ y $\psi_\tau = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$ ó $\psi_\tau = \mathcal{O}(1)$ y $\tau = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$.

Si comparamos el valor de Γ con el correspondiente a la explosión homogénea se encuentra que para $\Gamma = \mathcal{O}(1)$ es $\Gamma_c = \mathcal{O}(\varepsilon) \ll 1$. En consecuencia, y al igual que ocurría en el modelo unidimensional, podría producirse la explosión térmica homogénea si se diesen las condiciones apropiadas para ello. En cambio si es $\Gamma = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$, con lo cual $\Gamma_c = \mathcal{O}(1)$, parece más difícil que se produzca la ignición pues el efecto del consumo de reactante es tan importante que impide la explosión térmica.

Para los valores de Γ en que existe ignición la solución de (6.88) y (6.89) debe considerarse como la descripción de una etapa inicial en la cual los efectos no estacionarios son despreciables. El tiempo de ignición, τ_o en primera aproximación, puede determinarse de forma más precisa analizando la etapa de transición. El procedimiento a seguir es análogo al del apéndice 3.5 y al del apartado 6.5 de manera que omitiremos algunos de los detalles del mismo.

La existencia de ignición en τ_o significa que el problema

$$\begin{aligned} \Delta\psi_{o,\tau} + D\tau Y_o \exp\left[\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta\right] \psi_{o,\tau} = \\ -D \exp\left[\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta\right] \{Y_o + \tau Y_{o,\tau}\} \end{aligned} \quad (6.90a)$$

$$\psi_{o,\tau}(\xi, 0, \tau) = (\psi_{o,\tau})_\theta(\xi, \pi/4, \tau) = (\psi_{o,\tau})_\xi(\infty, \theta, \tau) = 0 \quad (6.90b)$$

carece de solución acotada en $\tau = \tau_o$ y en consecuencia el problema lineal autoadjunto

$$L[\phi] \equiv \Delta\phi + D\tau_o y_o \exp\left[\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta\right] \phi = 0 \quad (6.91a)$$

$$\varphi(\xi, 0) = \phi_\theta(\xi, \pi/4) = \phi_\xi(\infty, \theta) = 0 \quad (6.91b)$$

donde $y_o(\xi, \theta) = Y_o(\xi, \theta, \tau_o)$ y $\varphi_o(\xi, \theta) = \psi_o(\xi, \theta, \tau_o)$, debe admitir una autofunción, ϕ , no nula y tal que

$$\int_{\Omega} D e^{\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta} [y_o + \tau_o Y_{o,\tau}(\tau_o)] \phi \, \xi d\theta d\xi \neq 0 \quad (6.91c)$$

En la última parte de la etapa inicial, cuando $\tau_o - \tau \ll 1$, la temperatura puede expresarse en términos de esta autofunción. Para ello buscamos la solución de los problemas (6.88) y (6.89) como

$$\psi_o(\xi, \theta, \tau) = \varphi_o(\xi, \theta) + \lambda_1(\hat{\tau})A_1(\xi, \theta) + \lambda_2(\hat{\tau})A_2(\xi, \theta) + \dots$$

$$Y_o(\xi, \theta, \tau) = y_o(\xi, \theta) - \frac{\partial Y_o(\xi, \theta, \tau_o)}{\partial \tau} \hat{\tau} + \dots$$

siendo $\hat{\tau} = \tau_o - \tau \ll 1$. Al llevar estas expresiones a (6.88a) se encuentra que A_1 debe verificar

$$L[A_1] = D \frac{\hat{\tau}}{\lambda_1} e^{\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta} \{y_o + \tau_o Y_{o,\tau}(\tau_o)\}$$

con las condiciones (6.91b). A consecuencia de (6.91c) la existencia de solución requiere $\hat{\tau}/\lambda_1 \rightarrow 0$, y por tanto ésta es $A_1 = \phi$. Para A_2 se obtiene la siguiente ecuación:

$$L[A_2] = \frac{\hat{\tau}}{\lambda_2} D e^{\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta} \{y_o + \tau_o Y_{o,\tau}(\tau_o)\} - \frac{1}{2} \phi^2 \frac{\lambda_1^2}{\lambda_2} D \tau_o y_o e^{\varphi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta}$$

con las mismas condiciones de contorno. Al aplicar la condición de resolubilidad se determinan las funciones λ_2 y λ_1 siendo $\lambda_2 \sim \hat{\tau}$ y $\lambda_1 = -a_1 \sqrt{\hat{\tau}}/\tau_o$ con

$$a_1 = \left\{ 2 \frac{\int_{\Omega} (y_o + \tau_o Y_{o,\tau}) e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta} \phi \xi d\xi d\theta}{\int_{\Omega} y_o e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta} \phi^3 \xi d\xi d\theta} \right\}^{1/2} \quad (6.92)$$

con lo cual puede ponerse:

$$\psi_o(\xi, \theta, \tau) = \varphi_o(\xi, \theta) - \frac{a_1}{\sqrt{\tau_o}} \sqrt{\tau_o - \tau} \phi(\xi, \theta) + \mathcal{O}(\tau_o - \tau) \quad (6.93)$$

La solución para los términos de orden ε , ψ_1 e Y_1 , se busca de la forma

$$\psi_1 = \nu_1(\hat{\tau}) B_1(\xi, \theta) + \nu_2(\hat{\tau}) B_2(\xi, \theta) + \dots$$

$$Y_1 = \rho_1(\hat{\tau}) y_1(\xi, \theta) + \rho_2(\hat{\tau}) y_2(\xi, \theta) + \dots$$

Mediante las condiciones de resolubilidad para los problemas correspondientes a B_1 y B_2 pueden determinarse las funciones $\nu_1(\hat{\tau})$, $\nu_2(\hat{\tau})$ y $\rho_1(\hat{\tau})$ obteniendo finalmente

$$\psi_1 = -a_3 \frac{\phi(\xi, \theta)}{\tau_o - \tau} + \mathcal{O}(1) \quad (6.94)$$

con

$$a_3 = \frac{\pi}{2} \frac{\int_{\Omega} \phi^2 \xi d\xi d\theta}{\int_{\Omega} D y_o e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta} \phi^3 \xi d\xi d\theta} \quad (6.95)$$

Al comparar ψ_o y $\varepsilon \psi_1$ se encuentra que la escala en la cual los efectos no estacionarios son de orden unidad es, al igual que en el apéndice 3.5, $\varepsilon^{2/3}$. En consecuencia las variables a emplear para describir la etapa de transición son

$$\tau = \tau_o \left(1 + \varepsilon^{2/3} \sigma \right)$$

$$\psi = \varphi_o(\xi, \theta) + \varepsilon^{1/3} \varphi_1(\xi, \theta, \sigma) + \varepsilon^{2/3} \varphi_2(\xi, \theta, \sigma) + \dots$$

$$Y = y_o(\varepsilon, \theta) + \varepsilon^{2/3} y_1(\xi, \theta, \sigma) + \dots$$

que llevados a 6.14 proporcionan:

$$\mathbf{L}[\varphi_1] = 0$$

$$\frac{\partial y_1}{\partial \sigma} = \frac{\eta}{2} \frac{\partial y_o}{\partial \eta} - \Gamma D \tau_o e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta}$$

$$\mathbf{L}[\varphi_2] = \pi \frac{\partial \varphi_1}{\partial \sigma} - \Gamma D \tau_o e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta} \left[\frac{1}{2} y_o \varphi_1^2 + \sigma (y_o + \tau_o Y_{o,\tau}) \right]$$

junto con las condiciones de contorno:

$$\varphi_i(\xi, 0, \sigma) = \varphi_{i,\theta}(\xi, \pi/4, \sigma) = \varphi_{i,\xi}(\infty, \theta, \sigma) = 0 \quad (i = 1, 2)$$

$$y_1(\infty, \theta, \sigma) = 0$$

y las condiciones iniciales:

$$\sigma \rightarrow -\infty : \quad \varphi_1 \rightarrow -a_1 \sqrt{-\sigma} \phi, \quad y_1 \rightarrow \tau_o \frac{\partial Y_o}{\partial \tau} \sigma$$

De las dos primeras ecuaciones se obtiene

$$\varphi_1 = f_1(\sigma) \phi$$

$$y_1 = \tau_o \frac{\partial Y_o}{\partial \tau} \sigma$$

siendo $f_1(\sigma)$ una función que debe verificar la condición $f_1(\sigma \rightarrow -\infty) \sim -a_1 \sqrt{-\sigma}$ y tal que el problema para φ_2 sea resoluble. Mediante la condición de resolubilidad correspondiente se encuentra la siguiente ecuación para f_1 :

$$\frac{a_2}{\tau_o} \frac{df_1}{d\sigma} = \left(\frac{f_1}{a_1} \right)^2 + \sigma \quad (6.96)$$

donde

$$a_2 = \pi \frac{\int_{\Omega} \phi^2 \xi d\xi d\theta}{\int_{\Omega} D(y_o + \tau_o Y_{o,\tau}) e^{\varphi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta} \phi \xi d\xi d\theta} \quad (6.97)$$

De manera análoga al apéndice 3.5 esta ecuación puede reducirse a una de Ricatti cuya solución se expresa en términos de las funciones de Airy, llegándose a:

$$\psi(\xi, \theta, \tau) = \varphi_o(\xi, \theta) + a_1 \left(\varepsilon \frac{a_1 a_2}{\tau_o} \right)^{1/3} \phi(\xi, \theta) \frac{A'_i(-s)}{A_i(-s)} \quad (6.98)$$

con

$$s = \left(\frac{\tau_o}{\varepsilon a_1 a_2} \right)^{2/3} \frac{\tau - \tau_o}{\tau_o} \quad (6.99)$$

La divergencia de esta expresión se produce en $s_o = 2.3381$ y, por tanto, el nuevo tiempo de ignición es

$$\tau_{ig} = \tau_o + 2.3381 \tau_o^{1/3} (\varepsilon a_1 a_2)^{2/3} \quad (6.100)$$

que referido al tiempo químico puede expresarse como:

$$\hat{t}_{ig} = \frac{2.547}{\pi \varepsilon} \tau_o \left(1 + 2.3381 a_5 \varepsilon^{2/3} \right) \quad (6.101)$$

La figura 6.20 muestra los coeficientes a_1 , a_2 , a_3 y el valor de τ_o para distintos Γ y la figura 6.21 los coeficientes $a_4 = a_1(a_1 a_2 / \tau_o)^{1/3}$ y $a_5 = (a_1 a_2 / \tau_o)^{2/3}$, que están ligados, respectivamente, a la amplitud del incremento de temperatura generado durante la etapa de transición y a la duración de la misma. La variación de a_4 y a_5 con Γ es similar a la que se encontraba en el caso unidimensional: la amplitud decrece mientras que la extensión aumenta, haciendo que este análisis no sea válido cuando $a_5 = \mathcal{O}(\varepsilon^{-2/3})$, esto significa que la duración de la etapa de transición es comparable a la inicial de forma que los efectos no estacionarios no pueden considerarse confinados en una etapa corta en la cual se admiten únicamente variaciones de ψ de orden $\varepsilon^{1/3}$ sino que deben incluirse en una etapa donde tanto las variaciones de ψ como la duración de la misma sean de orden unidad.

6.7. RESULTADOS Y CONCLUSIONES

De los resultados que se han obtenido al analizar el efecto del consumo de reactante deben destacarse como más significativos la diferencia cualitativa entre el desarrollo de la ignición en los modelos uni y bidimensional y la imposibilidad de proseguir el análisis con la hipótesis cuasiestacionaria cuando $\gamma \gg 1$.

En ambos modelos el régimen de ignición corresponde a valores del parámetro $\gamma = c_p R T_s^2 / \pi q \varepsilon^2 E$ de orden unidad. En el unidimensional se precisa consumir una cantidad apreciable de reactante, tanto mayor cuanto mayor sea γ , para producir la ignición y ésta ocurre en tiempos crecientes con γ pero del orden de $t_q / 2\pi \varepsilon^2$, siendo $t_q = c_p R T_s^2 / q E B e^{-E/RT_s}$ el tiempo químico característico. La ignición en el caso bidimensional tiene lugar en un tiempo muy aproximadamente igual a $2.547 t_q / \pi \varepsilon$ con un consumo de reactante de orden ε . Por tanto la concentración de temperatura inerte generada por el efecto geométrico asociado a la presencia de la esquina tiene consecuencias semejantes sobre el tiempo de ignición y el consumo de reactante: ambos se reducen en un factor de ε .

Cuando γ es de orden $1/\varepsilon$ ($\Gamma = \mathcal{O}(1)$) existen también notables diferencias entre el comportamiento de ambos modelos. En el unidimensional la temperatura aumenta muy lentamente siendo de orden ε durante un intervalo de tiempo, que puede ser grande, hasta que finalmente se hace de orden unidad y entra en juego la cinética de tipo Frank-Kamenetskii. A partir de ese momento, e incluso antes, pudiera ser necesario retener el efecto de la pérdida de calor, con lo cual el problema no podría resolverse

independientemente de ε . Para valores de $\Gamma \lesssim 0.5$ existe ignición en el modelo bidimensional, aunque ahora con un consumo de reactante de orden unidad, siendo el tiempo de ignición del orden de $2.547t_q/\pi\varepsilon$ y creciente con Γ . Este hecho es sin duda consecuencia del efecto geométrico. Cuando Γ es mayor surgen dificultades análogas al caso unidimensional cuando se intentaba resolver el problema correspondiente a $\gamma = \mathcal{O}(1)$ pero grande ($\gamma \sim 15$). De hecho el comportamiento del valor máximo de la temperatura es muy similar en ambos casos lo que sugiere que el fallo se produce por una misma razón, que pudiera ser el carácter pulsante de la propagación del frente.

Respecto de la existencia de un régimen en el cual no se produce la ignición hay que señalar que la situación es totalmente diferente de la que se encontró al analizar el modelo simplificado. En éste, además del régimen de ignición, existe uno de extinción en el cual la temperatura tiende a cero en un tiempo infinito. Es decir, las ecuaciones correspondientes (6.19) admiten la solución $\theta = 0$, pero esto implica que entonces $y = 0$. La extinción se produce, por tanto, por agotamiento del combustible disponible, y esto sólo es posible en el caso homogéneo o cuando se considere el caso no homogéneo en un sólido finito. En los modelos analizados aquí, (6.14) y (6.18), al no poder ser $Y \equiv 0$ tampoco es posible $\psi = 0$ lo que descarta la existencia de un régimen de extinción análogo al del modelo simplificado.

De no producirse la ignición podría existir un régimen en el que tanto la función ψ como su derivada temporal se mantuviesen de orden unidad y que consistiese básicamente en la propagación de un frente de reacción que, debido a las pérdidas de calor, no fuese capaz de generar incrementos de temperatura respecto de la inerte de orden unidad. Este régimen sería análogo al que encuentran Averson, Barzykin y Merzhanov [ABM] al analizar la ignición de un sólido simétrico (slab, cilindro o esfera) bajo las hipótesis de energía de activación finita y número de Damköhler grande frente a la unidad. Para proceder a la integración numérica escriben las ecuaciones de conservación en forma adimensional mediante:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^\nu} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^\nu \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + Y e^{\theta/1+\beta\theta} = 0; \quad \theta(\xi, 0) - 1/\varepsilon = \theta(0, \tau) = \theta_\xi(\infty, \tau) = 0$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \tau} = -\Gamma_c Y e^{\theta/1+\beta\theta}; \quad Y(\xi, 0) = 1$$

donde $\theta = E(T - T_s)/RT_s^2$, $\tau = t/t_q$, $\xi = r\sqrt{D_a}$, $\beta = RT_s^2/E$ y t_q , ε y Γ_c tienen el mismo significado que hemos definido previamente. Para valores de Γ_c pequeños frente

a ε obtienen resultados muy similares a los que hemos encontrado cuando $\gamma = \mathcal{O}(1)$: la ignición se produce muy cerca de la pared con un consumo de reactante relativamente pequeño. Esta respuesta del sistema se modifica cuando Γ_c aumenta hasta valores del orden de ε . Nótese que $\Gamma_c/\varepsilon = 1$ corresponde a valores de los parámetros tales que la temperatura de la pared T_s es igual a la temperatura adiabática de combustión $T_b = T_o + q/c_p$. Si $\Gamma_c = \mathcal{O}(\varepsilon)$ el consumo de reactante es importante generándose un frente que se propaga hacia el interior del sólido. Mientras Γ_c sea menor que ε la reacción es capaz todavía de elevar la temperatura por encima de la de la pared haciendo $\theta > 0$ en la región donde está situado el frente pero sin que se produzca la ignición. Para $\Gamma_c > \varepsilon$ la temperatura es negativa en todos los puntos y el efecto de la reacción consiste en elevar ligeramente la temperatura por encima de la inerte, consumiéndose el reactante gracias al calor aportado desde el exterior. De estos resultados parece desprenderse que la ignición considerada como un aumento de la temperatura que cambia el orden de magnitud en un instante bien definido desaparece cuando $T_s = \mathcal{O}(T_o + q/c_p)$. Este rango corresponde precisamente a $\Gamma = \mathcal{O}(1)$ en el cual las soluciones presentan análogas características a las obtenidas cuando $\Gamma_c/\varepsilon = \mathcal{O}(1)$. En el análisis de las explosiones térmicas existe también un régimen similar denominado de reacción lenta cuando el número de Damkhöler es subcrítico [WI, pp. 576-581].

El análisis de la etapa de transición, en la cual se incluyen los efectos no estacionarios, asociados siempre a pérdidas de calor, muestra en ambos modelos que al aumentar γ ó Γ esta etapa se extiende sobre un intervalo de tiempo cada vez más grande, hasta que finalmente deja de ser pequeño comparado con la duración de la etapa inicial y que la amplitud del incremento de temperatura generado disminuye a consecuencia de que las pérdidas de calor actúan durante un tiempo mayor. Estos resultados estarían de acuerdo con la existencia del régimen de no ignición señalado anteriormente. Por una parte el menor incremento de temperatura es compatible con que tanto ψ como ψ_τ sean de orden unidad y, por otra, al ser la etapa de transición comparable a la inicial los términos no estacionarios deben retenerse, lo que es necesario para describir la propagación del frente si éste tiene carácter pulsante. En todo caso la existencia de este régimen debe entenderse como una conjetura razonable que tiene que ser objeto de un análisis posterior.

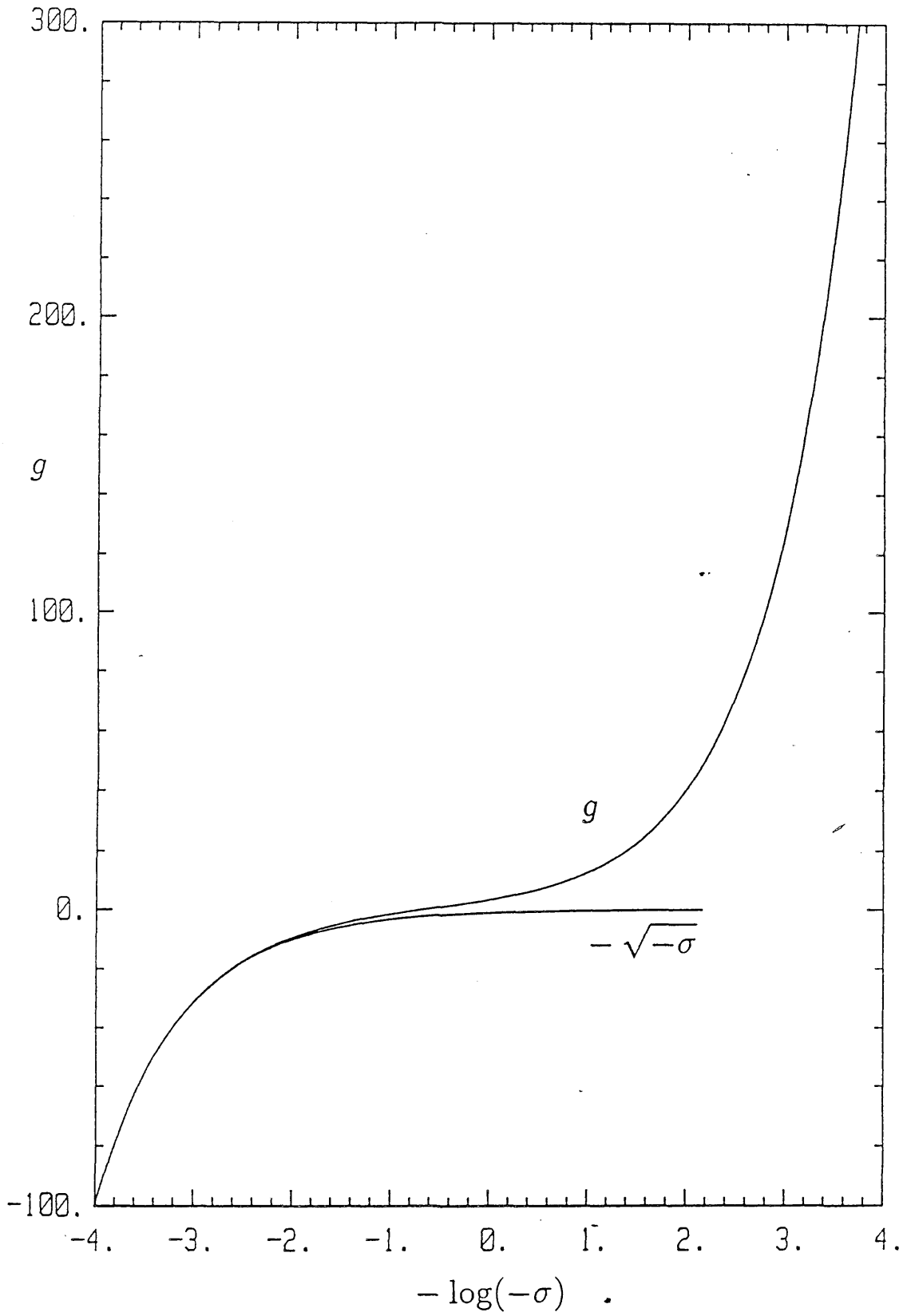


Figura 6.2 Gráfica de la función $g(\sigma)$ solución de (6.47).

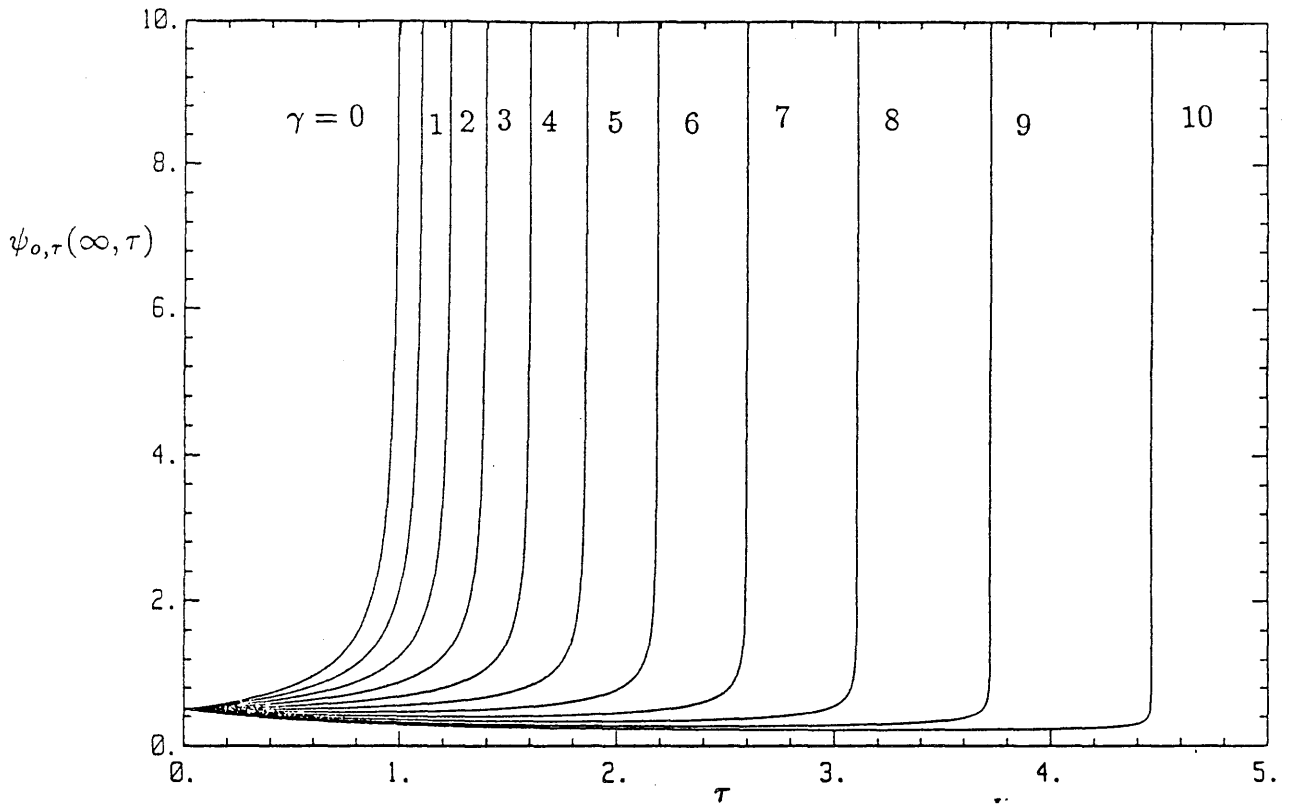


Figura 6.3 Valores de $\psi_{o,\tau}(\infty, \tau)$ para diversos γ .

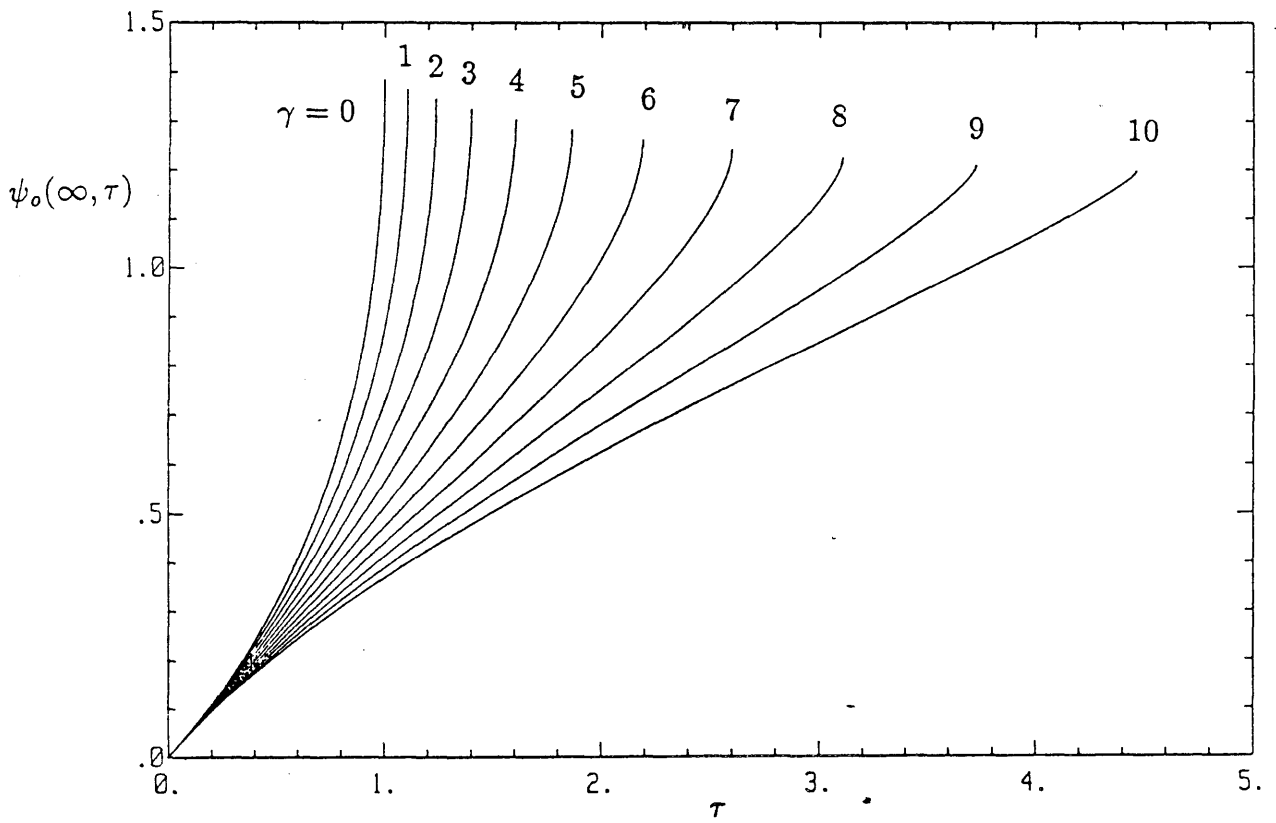


Figura 6.4 Valores de $\psi_o(\infty, \tau)$ para diversos γ .

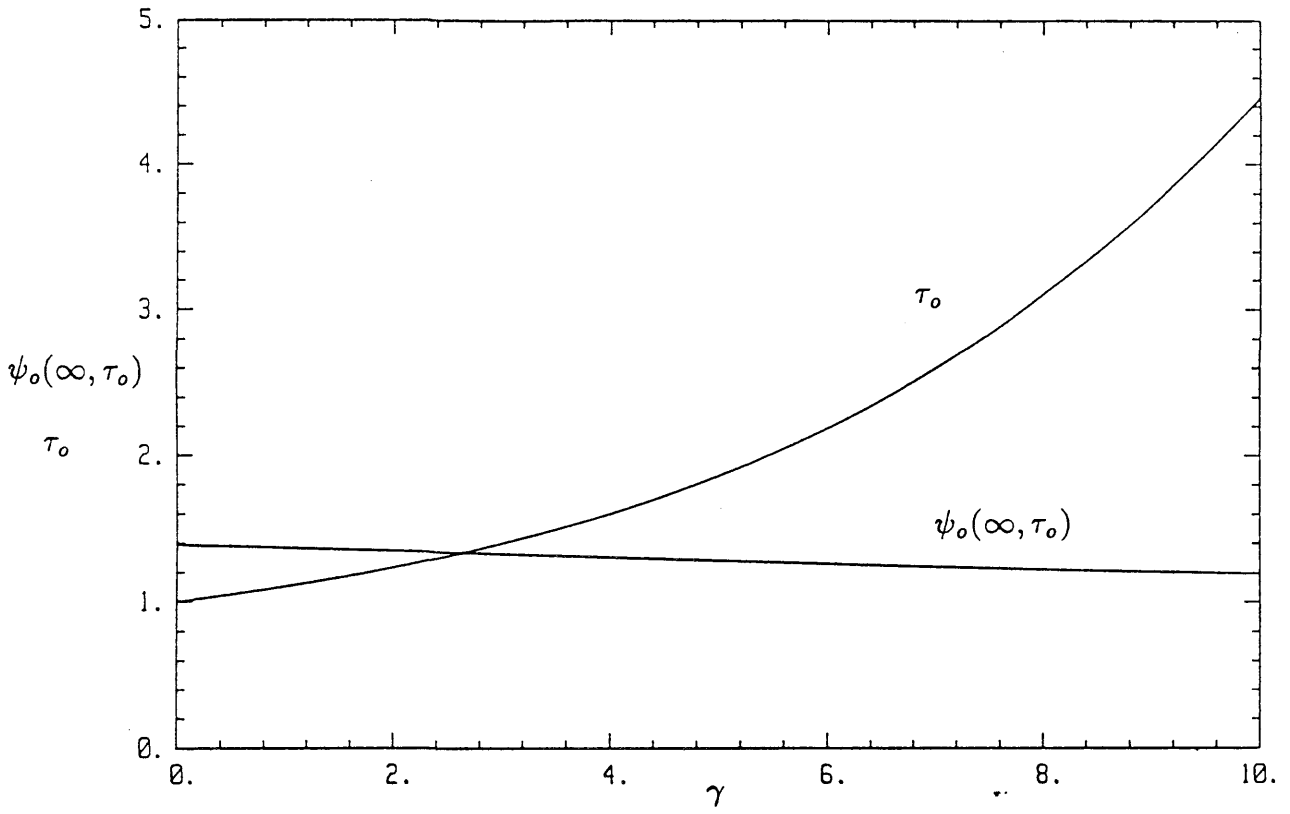


Figura 6.5 Valores de τ_o e incrementos máximos de temperatura $\psi_o(\infty, \tau_o)$ en función de γ .

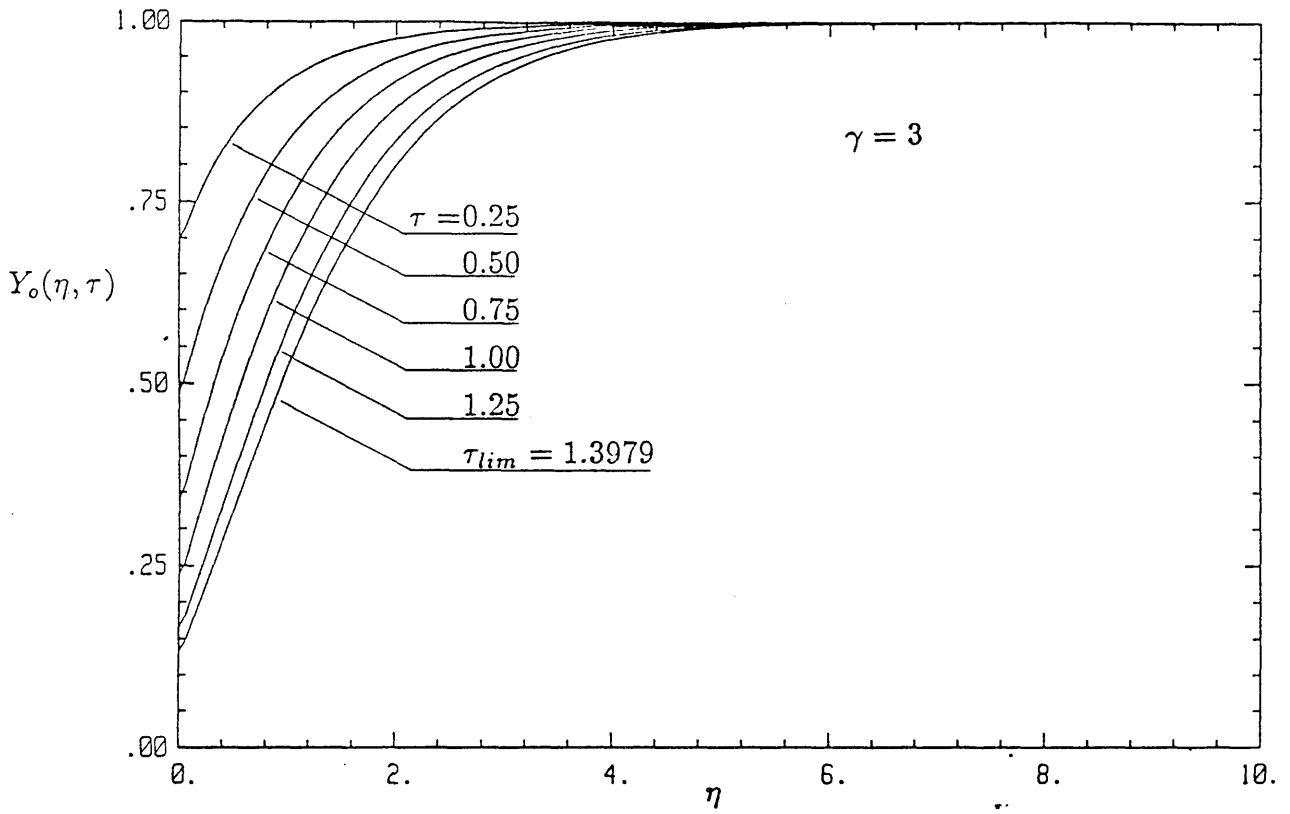


Figura 6.6.a Distribución espacial de concentración de reactante para $\gamma = 3$ y diversos tiempos.

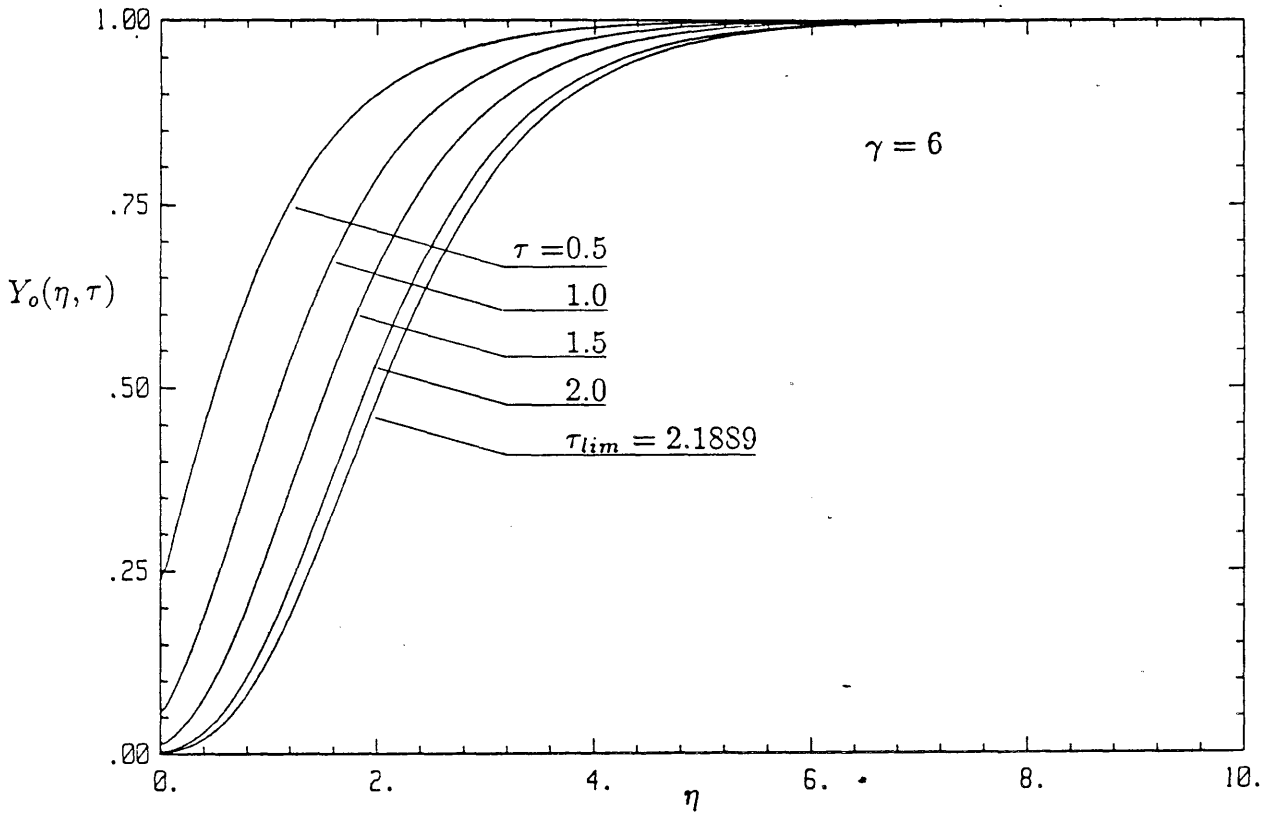


Figura 6.6.b Distribución espacial de concentración de reactante para $\gamma = 6$ y diversos tiempos.

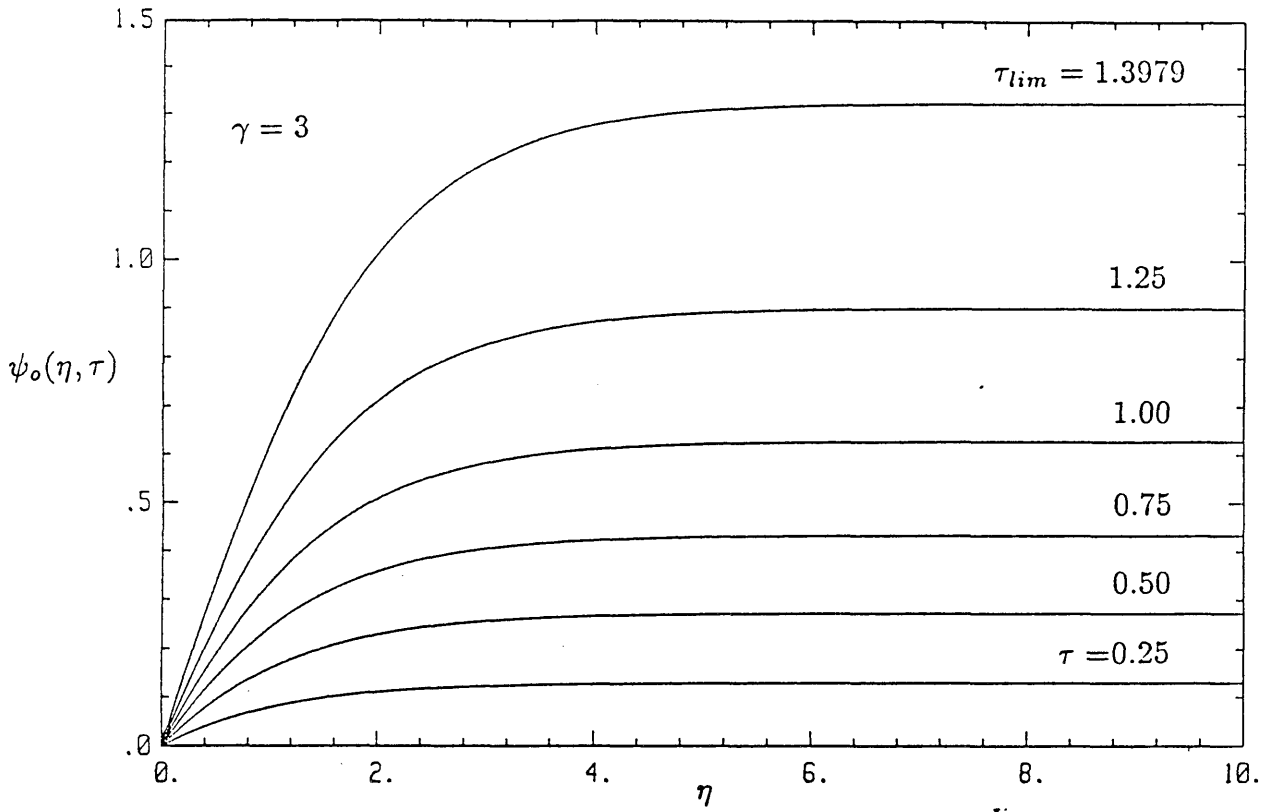


Figura 6.7.a Distribución espacial del incremento de temperatura para $\gamma = 3$ y diversos tiempos.

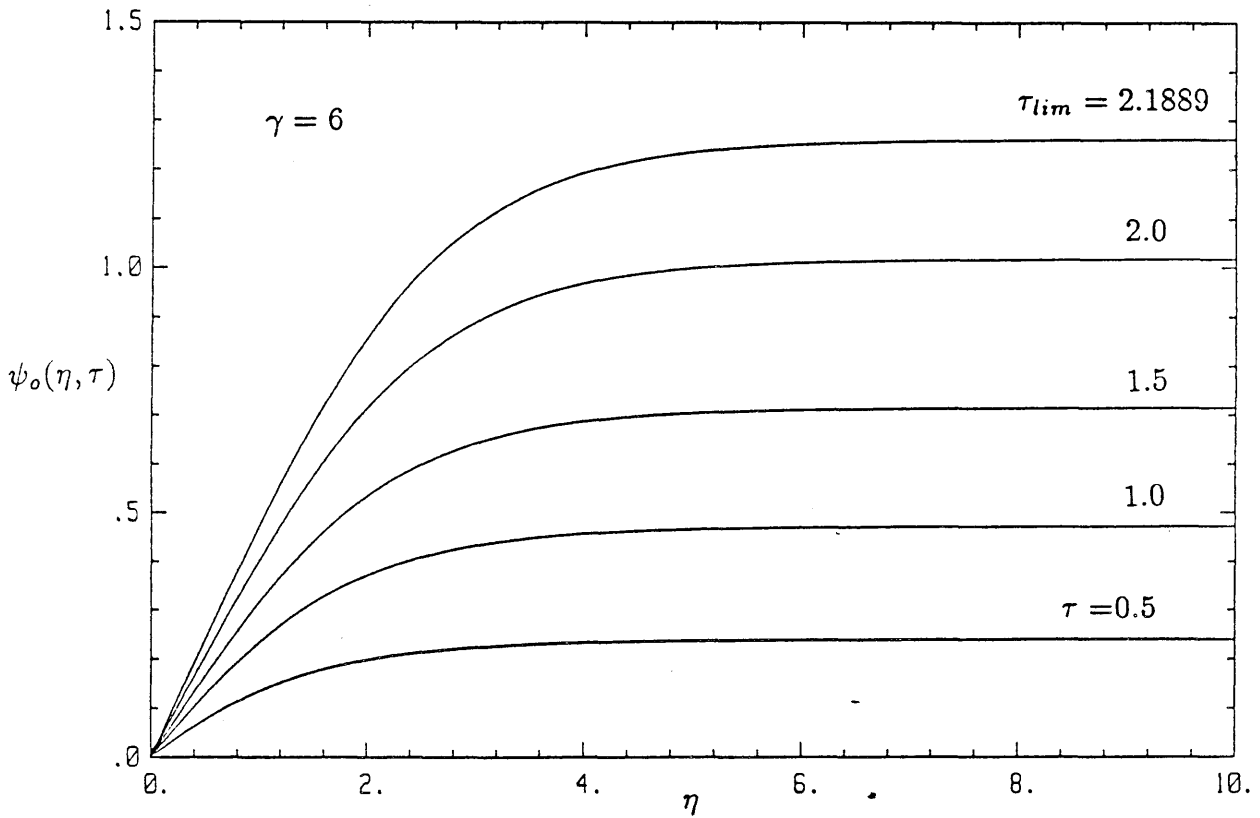


Figura 6.7.b Distribución espacial del incremento de temperatura para $\gamma = 6$ y diversos tiempos.

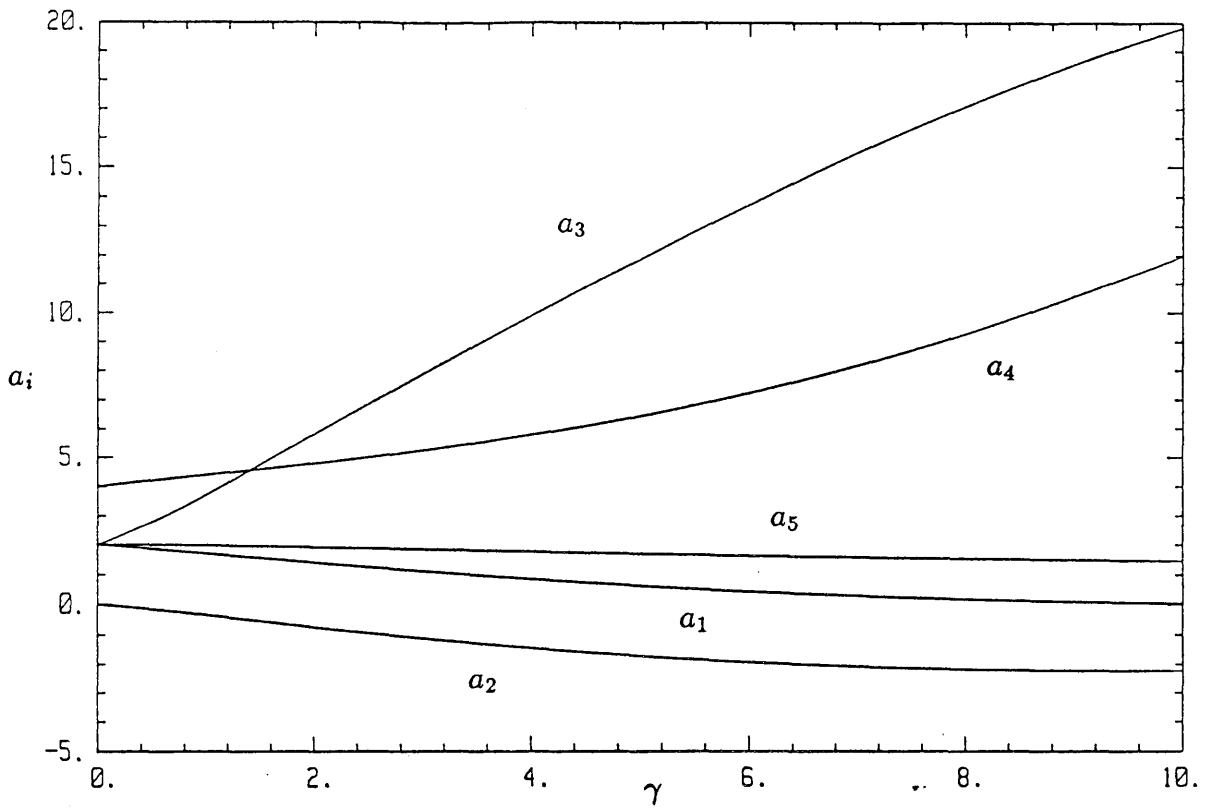


Figura 6.8 Coeficientes $a_1, a_2, a_3, a_4,$ y a_5 , en función de γ .

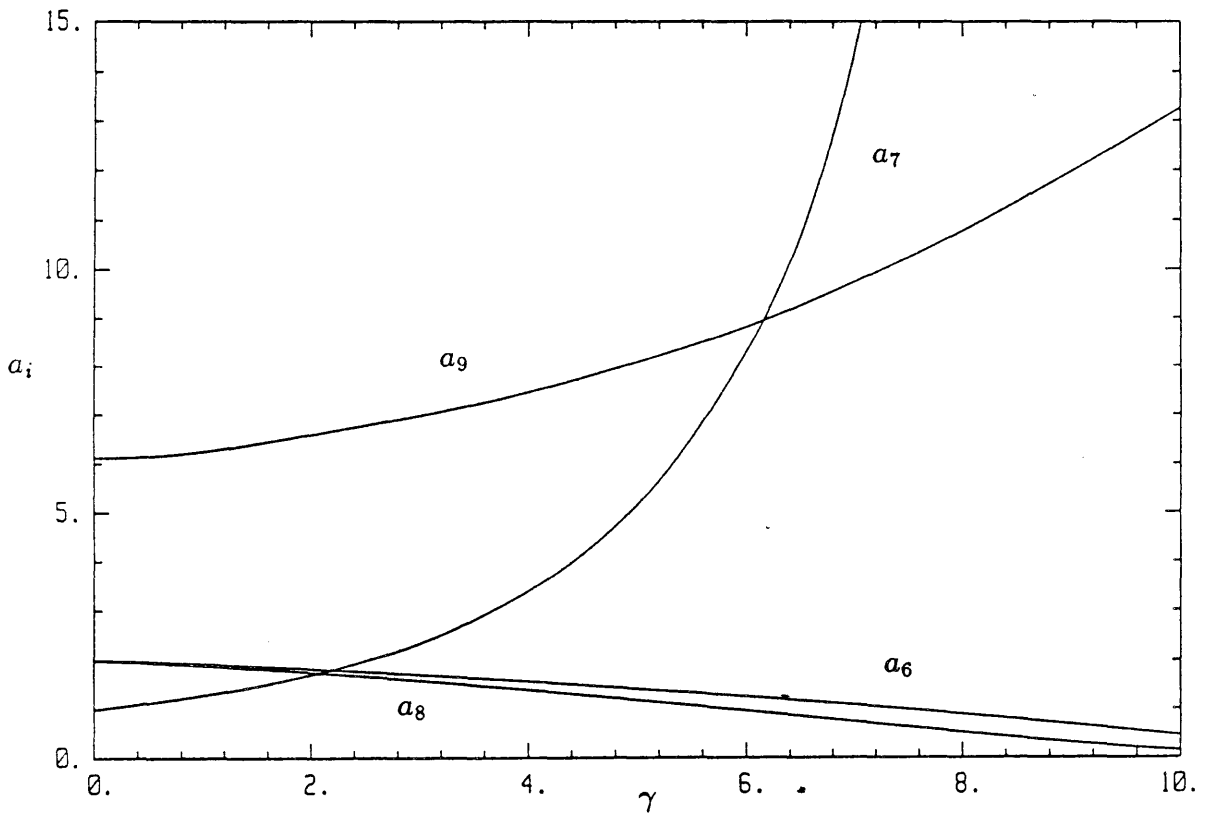


Figura 6.9 Coeficientes $a_6, a_7, a_8,$ y a_9 , en función de γ .

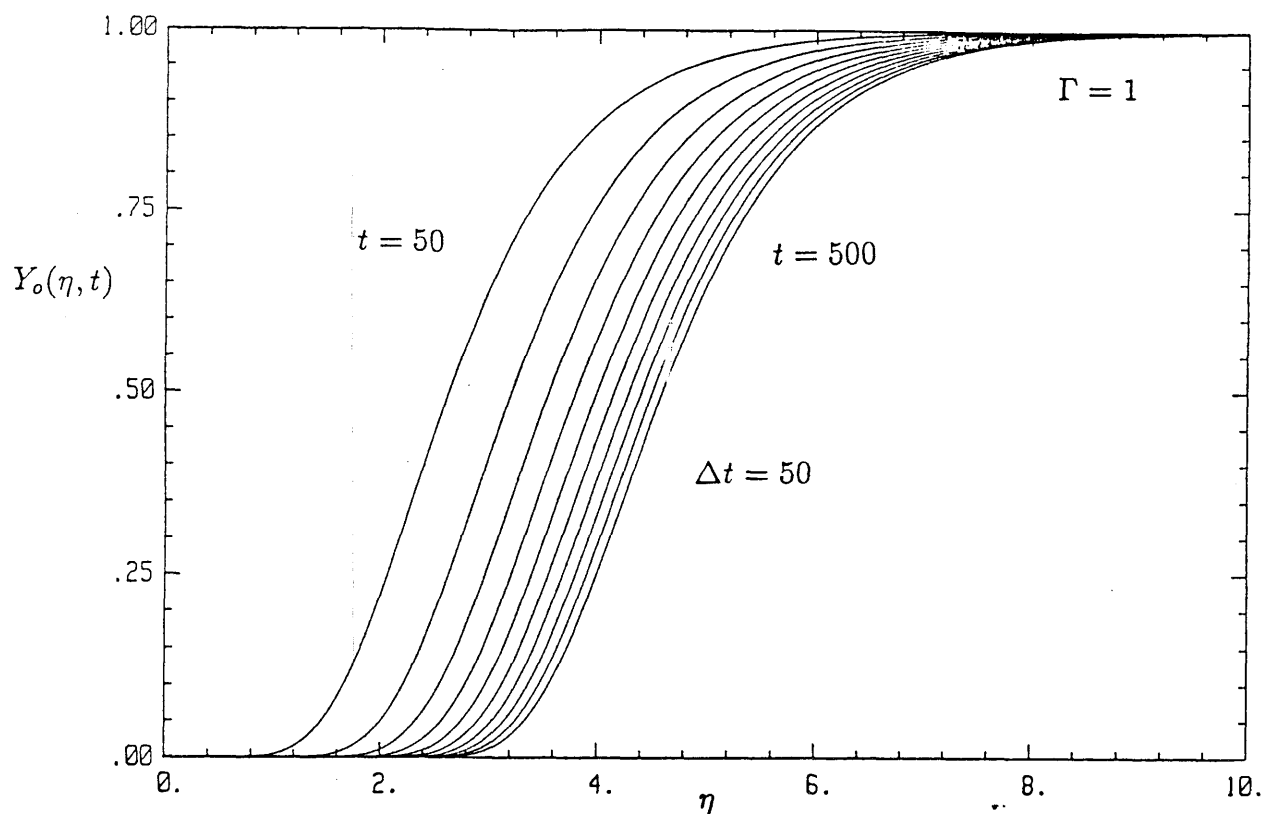


Figura 6.10.a Distribucion espacial de concentración de reactante para $\Gamma = \varepsilon\gamma = 1$ y distintos tiempos (las curvas equidistan $\Delta t = 50$).

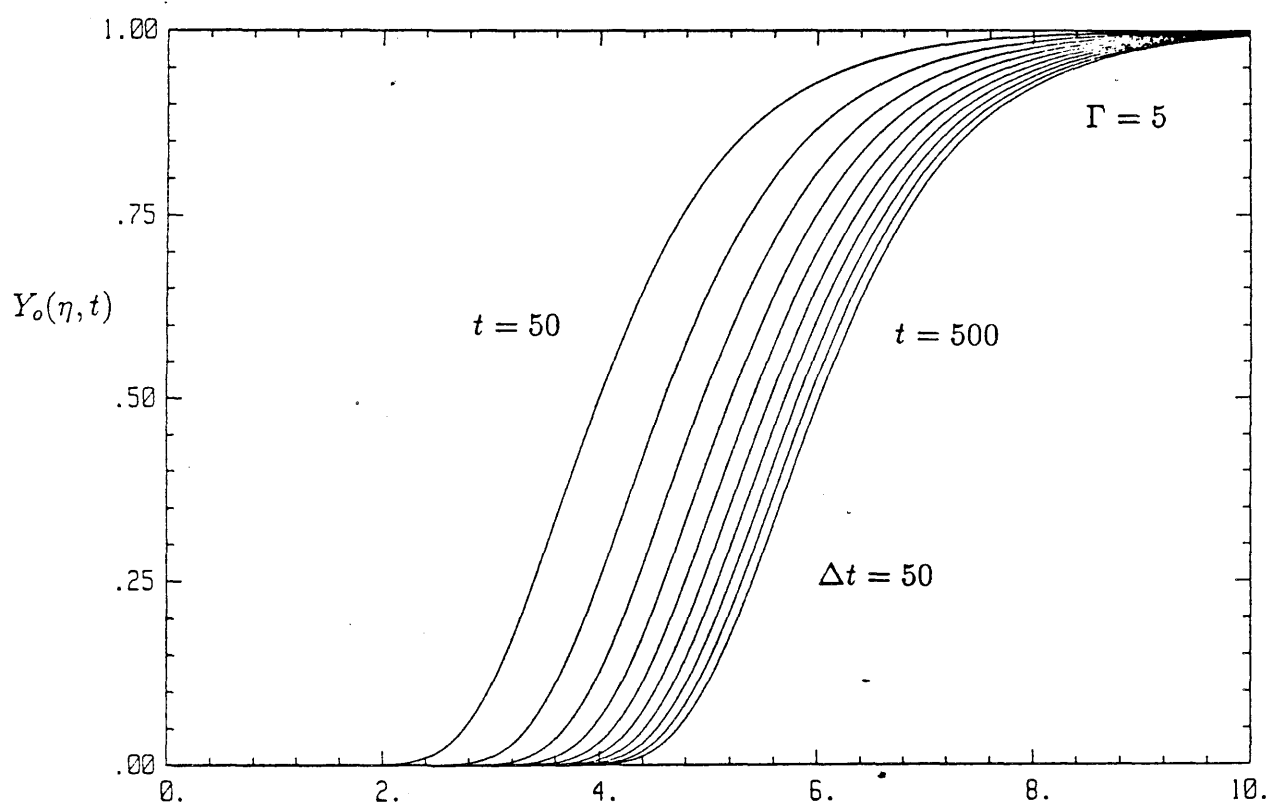


Figura 6.10.b Distribucion espacial de concentración de reactante para $\Gamma = \varepsilon\gamma = 5$ y distintos tiempos (las curvas equidistan $\Delta t = 50$).

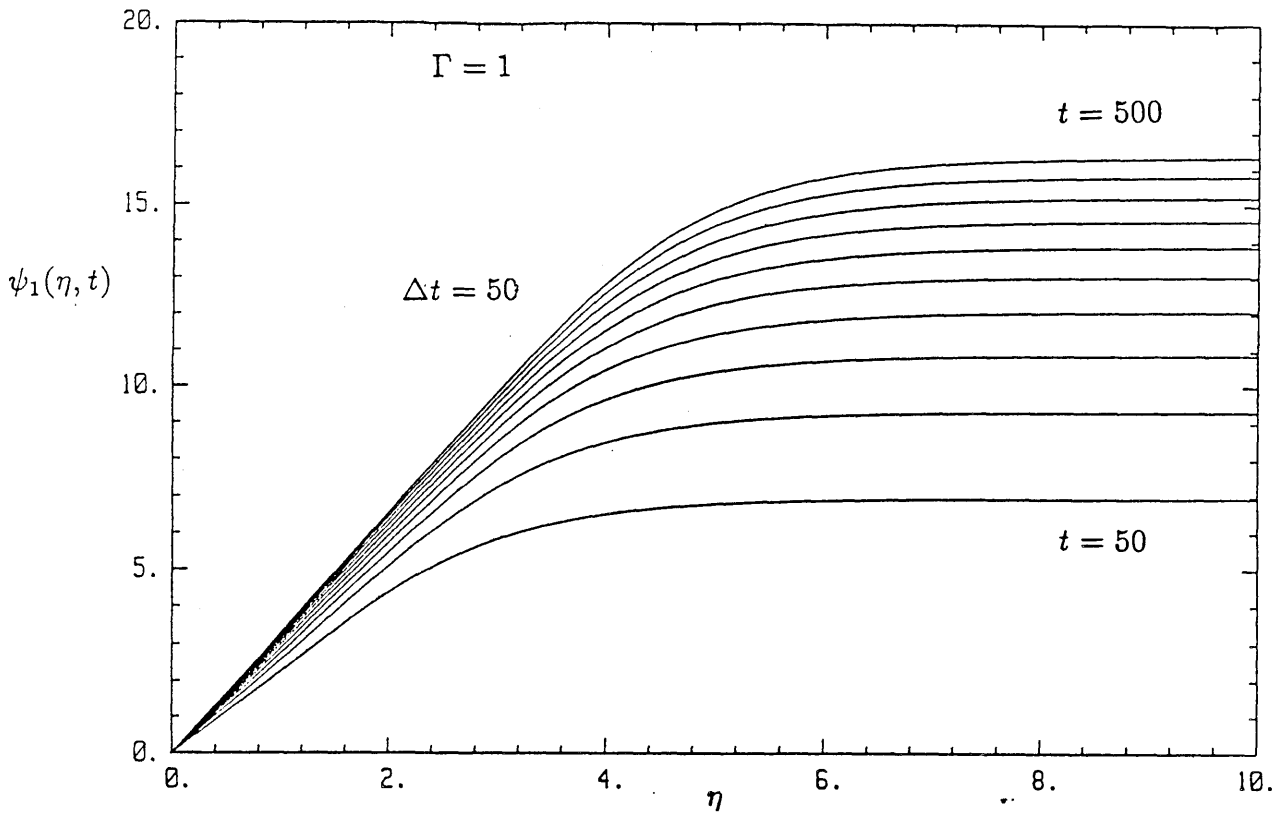


Figura 6.11.a Distribucion espacial del incremento de temperatura para $\Gamma = \varepsilon\gamma = 1$ y distintos tiempos (las curvas equidistan $\Delta t = 50$).

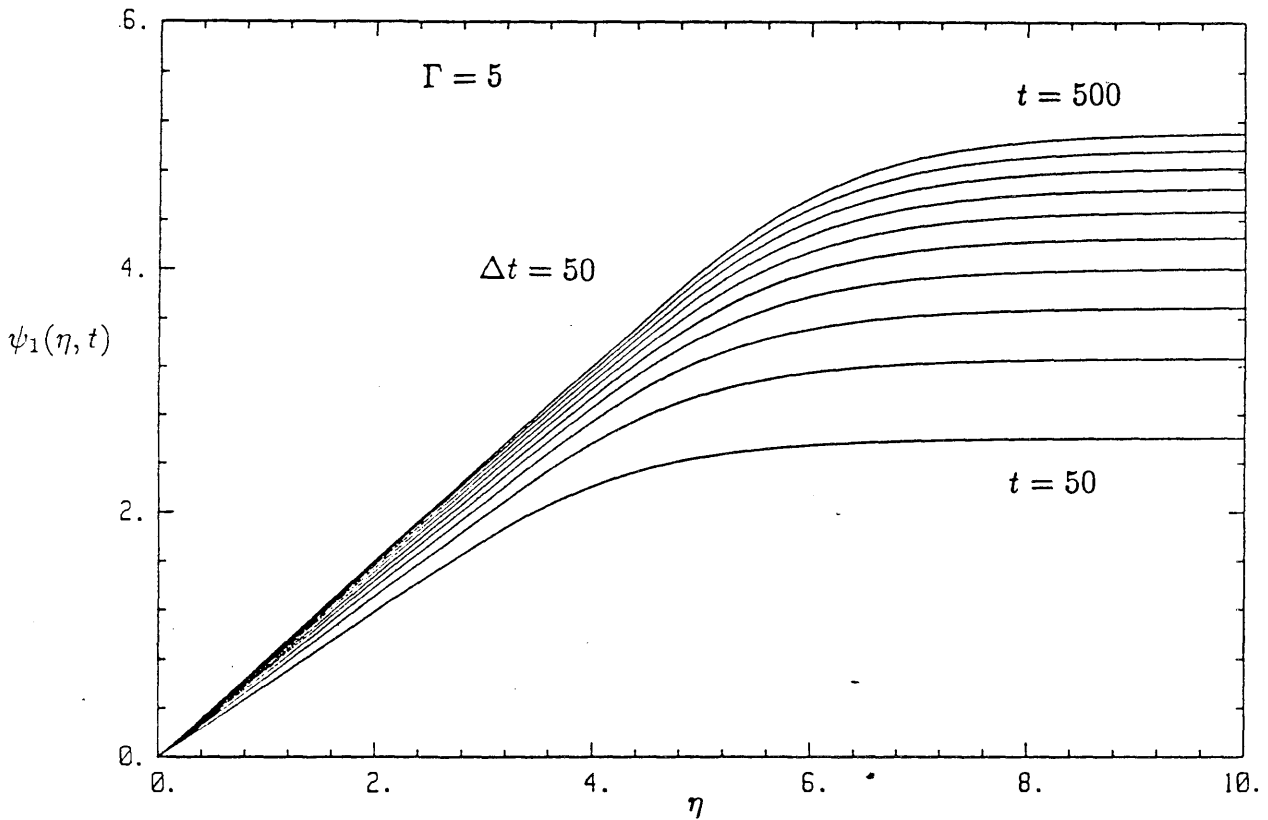


Figura 6.11.b Distribucion espacial del incremento de temperatura para $\Gamma = \varepsilon\gamma = 5$ y distintos tiempos (las curvas equidistan $\Delta t = 50$).

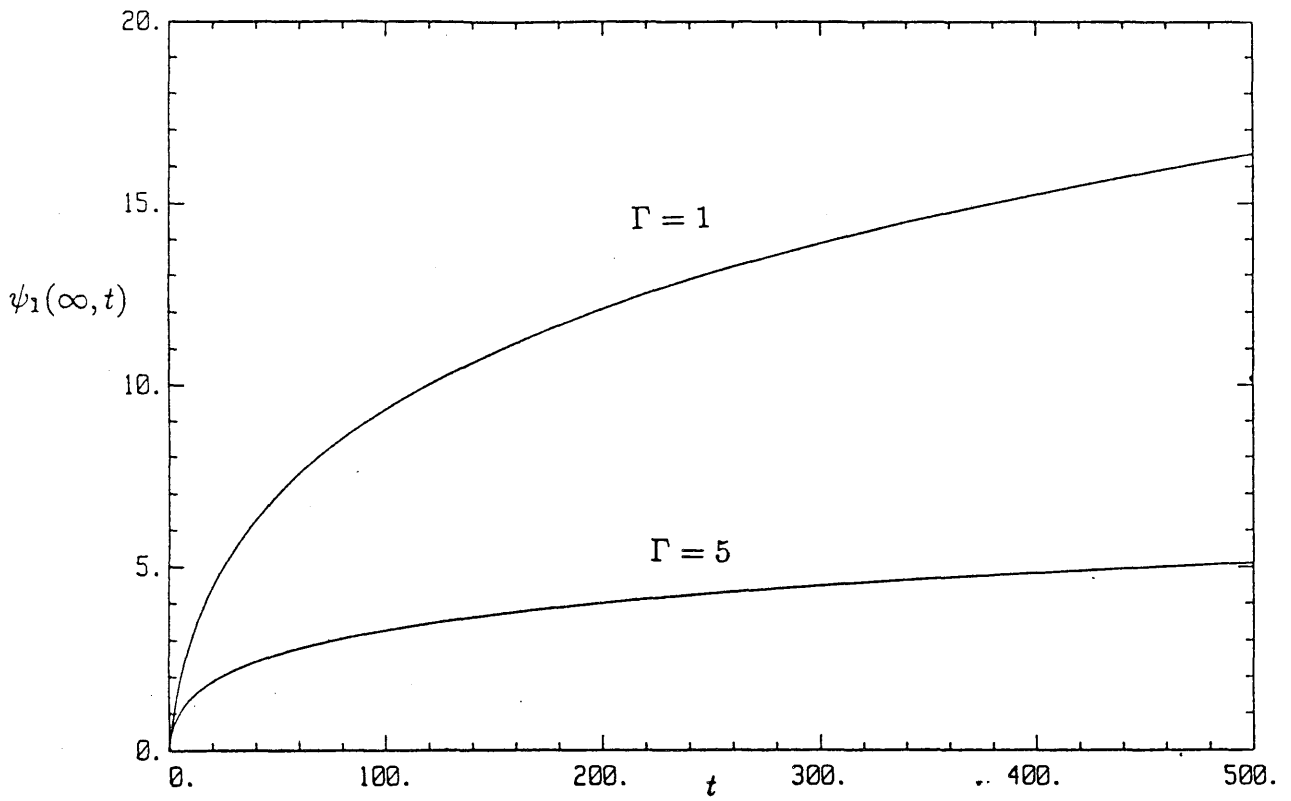


Figura 6.12 Valores máximos de ψ_1 en función de t para $\Gamma = 1$ y $\Gamma = 5$.

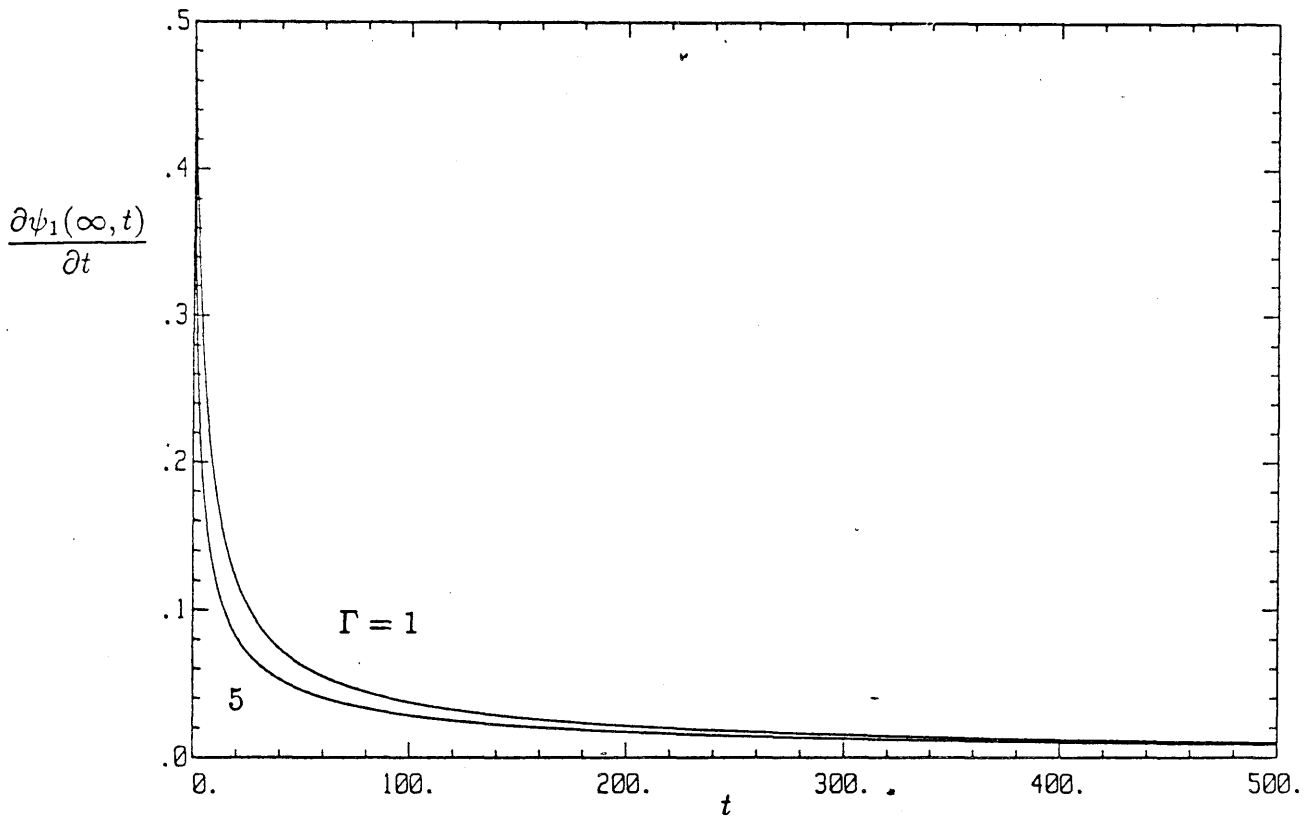


Figura 6.13 Valores máximos de $\psi_{1,t}$ en función de t para $\Gamma = 1$ y $\Gamma = 5$.

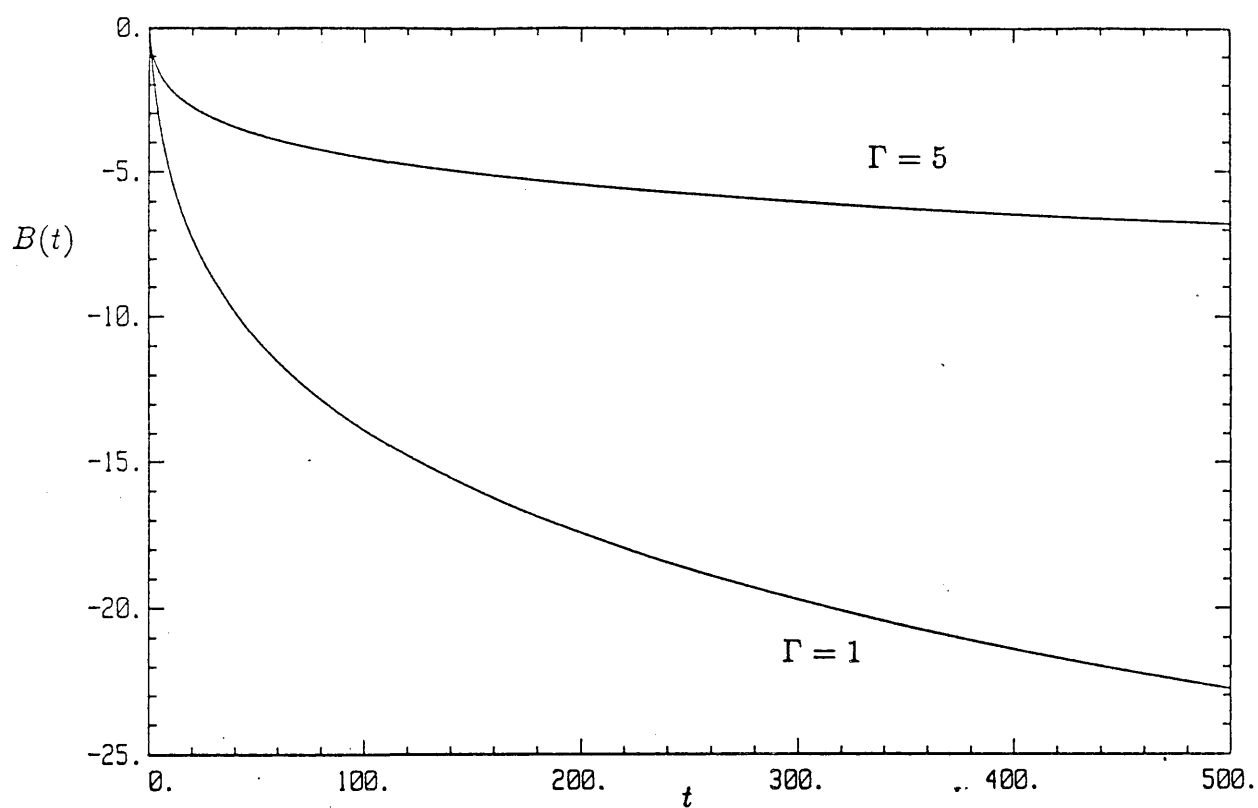


Figura 6.14 Gráfica de la función $B(t)$ para $\Gamma = 1$ y $\Gamma = 5$.

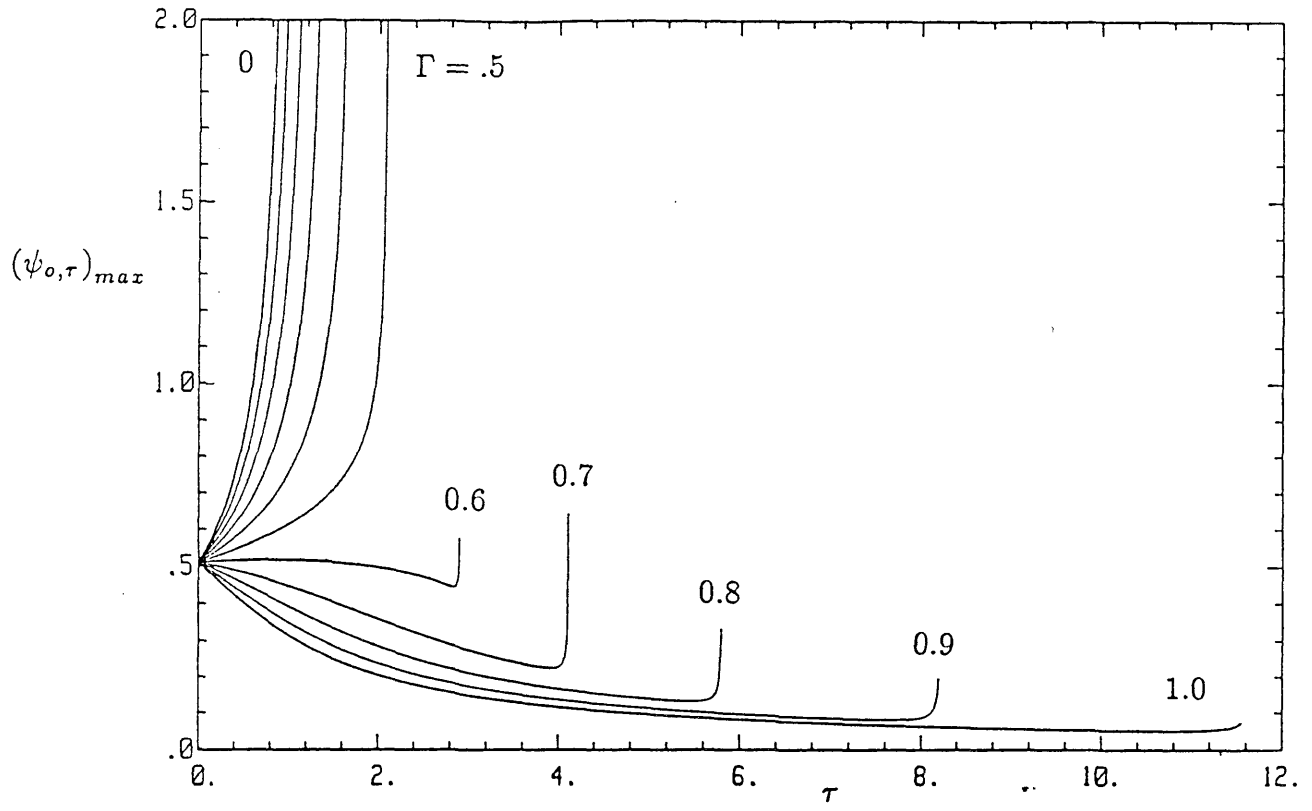


Figura 6.15 Valores de $\psi_o, \tau(\infty, \tau)$ para diversos Γ .

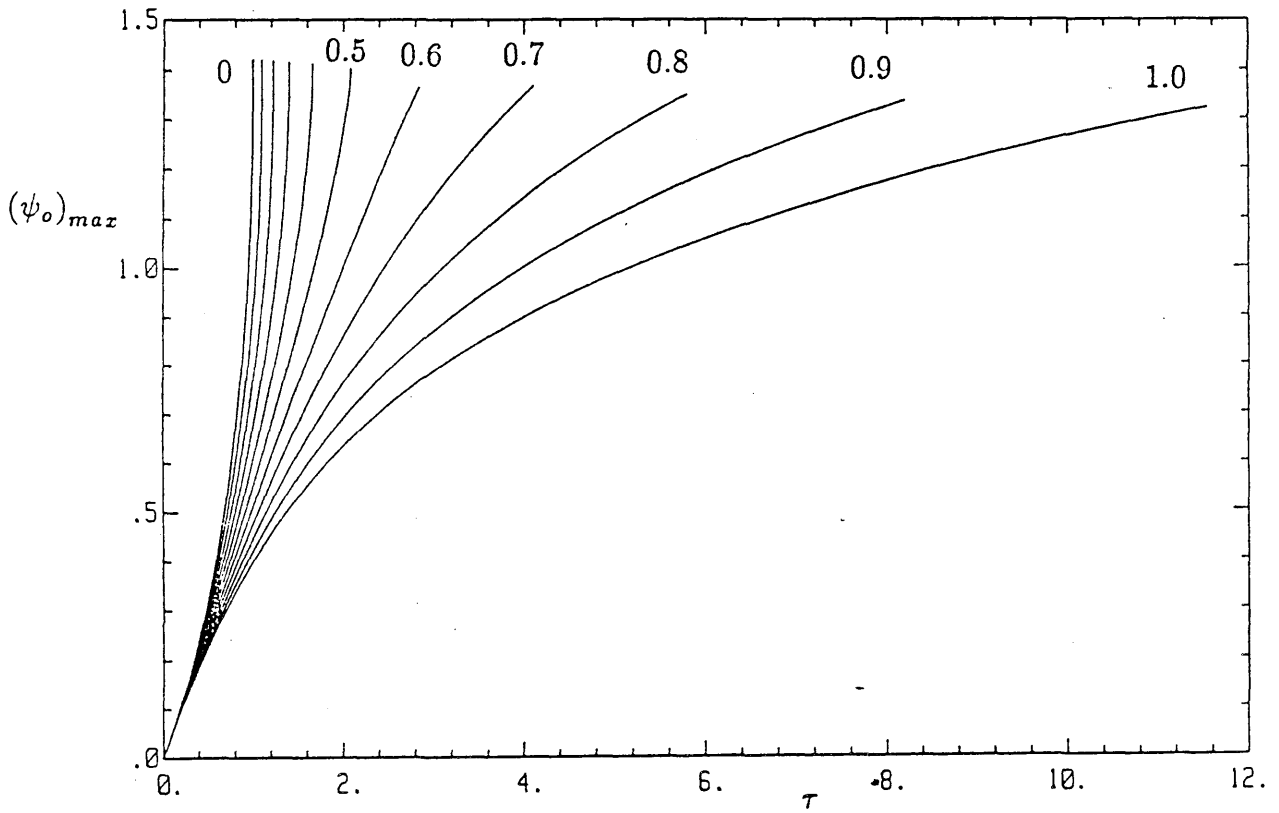


Figura 6.16 Valores de $\psi_o(\infty, \tau)$ para diversos Γ .

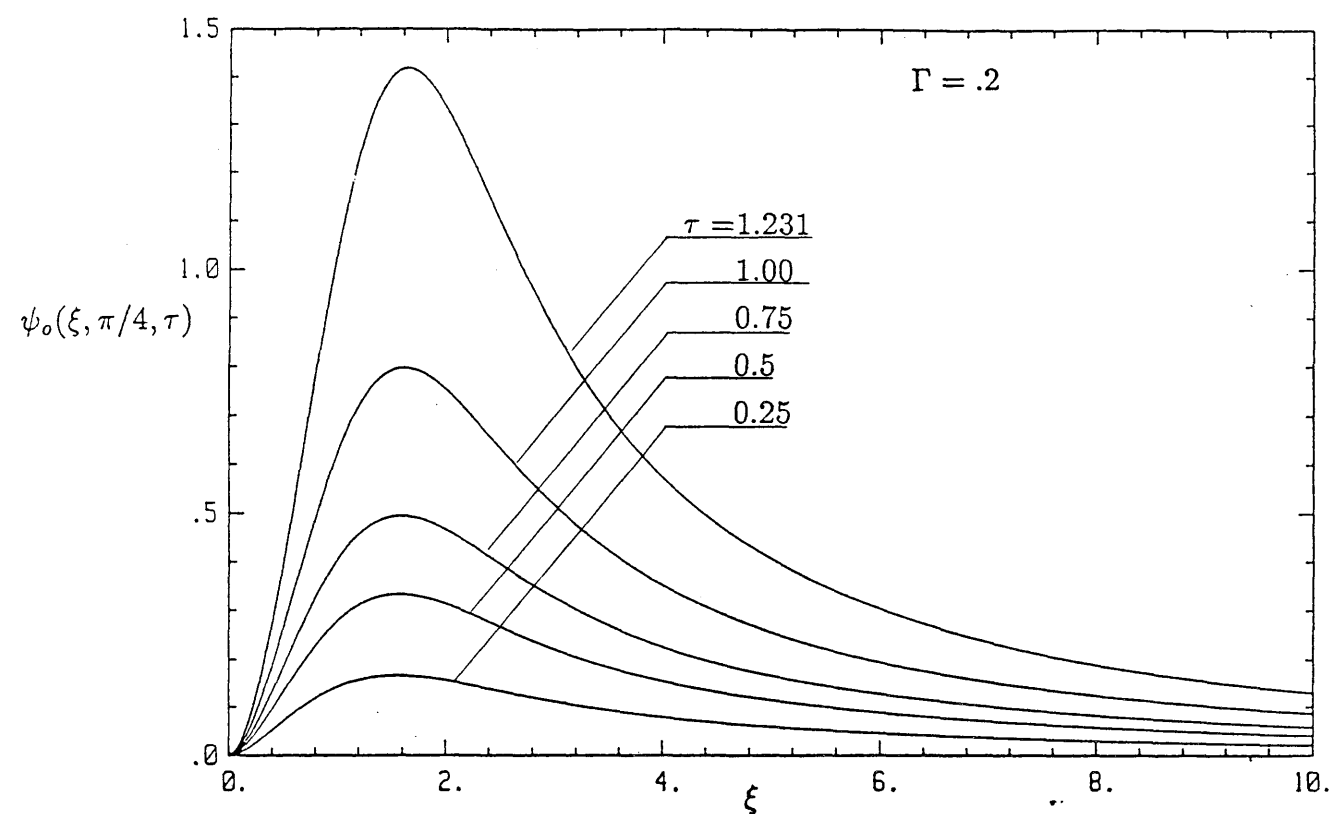


Figura 6.17.a Perfiles de temperatura en $\theta = \pi/4$ correspondientes a $\Gamma = .2$ para diversos tiempos.

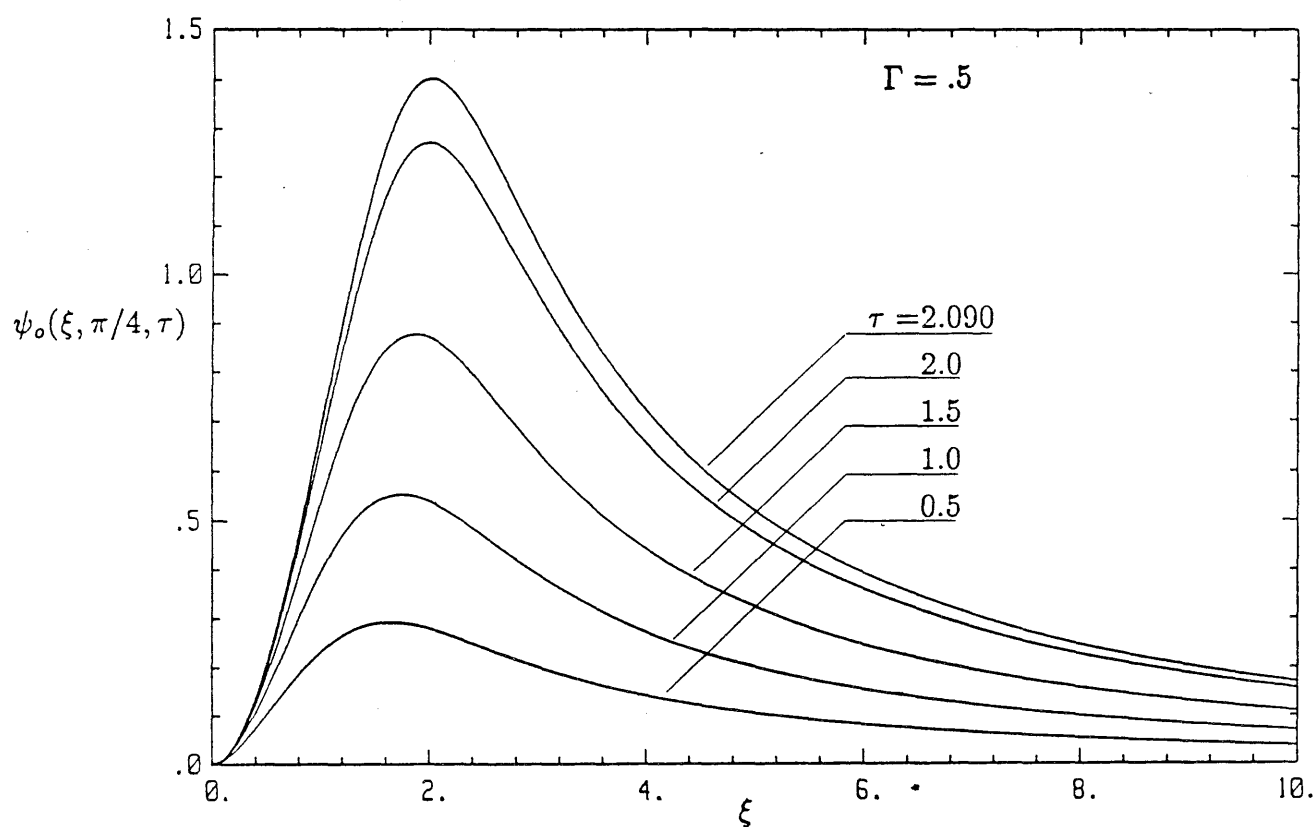


Figura 6.17.b Perfiles de temperatura en $\theta = \pi/4$ correspondientes a $\Gamma = .5$ para diversos tiempos.

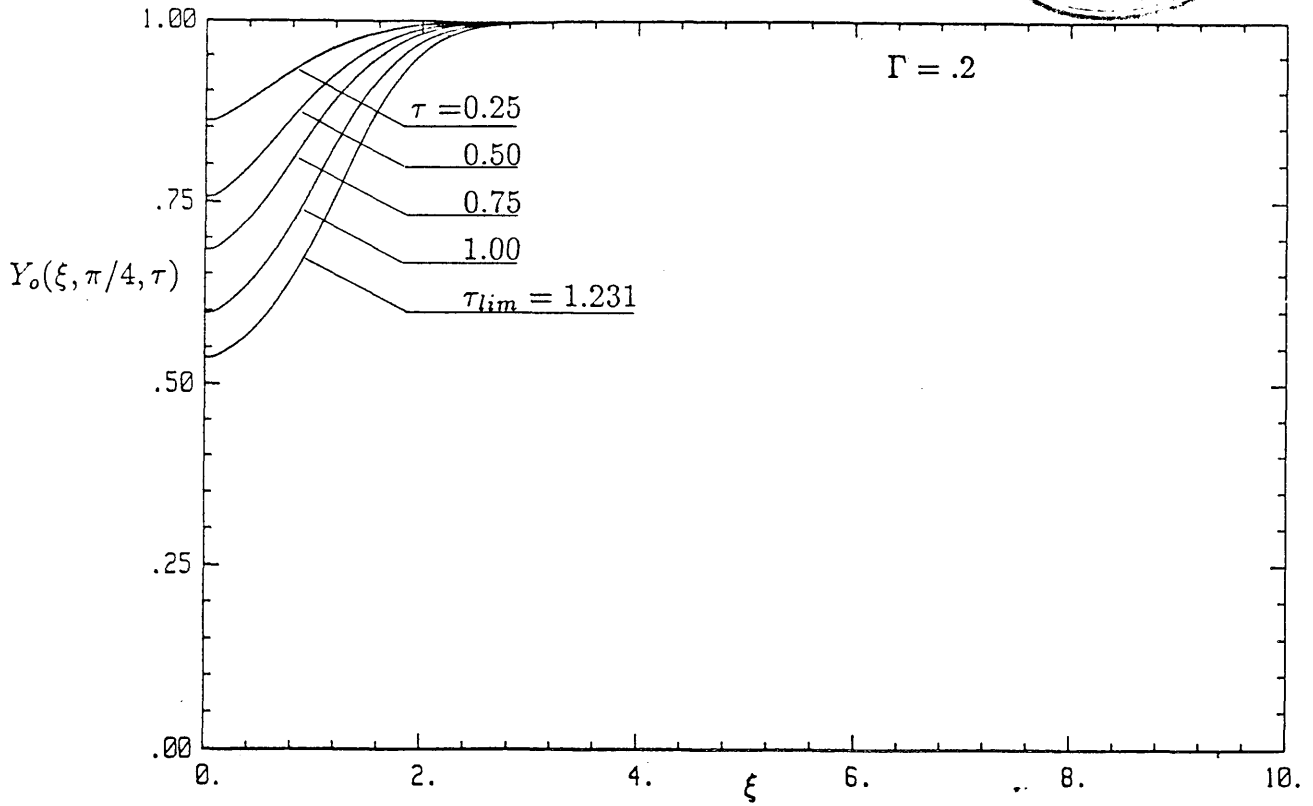


Figura 6.18.a Perfiles de concentración de reactante en $\theta = \pi/4$ correspondientes a $\Gamma = .2$ para diversos tiempos.

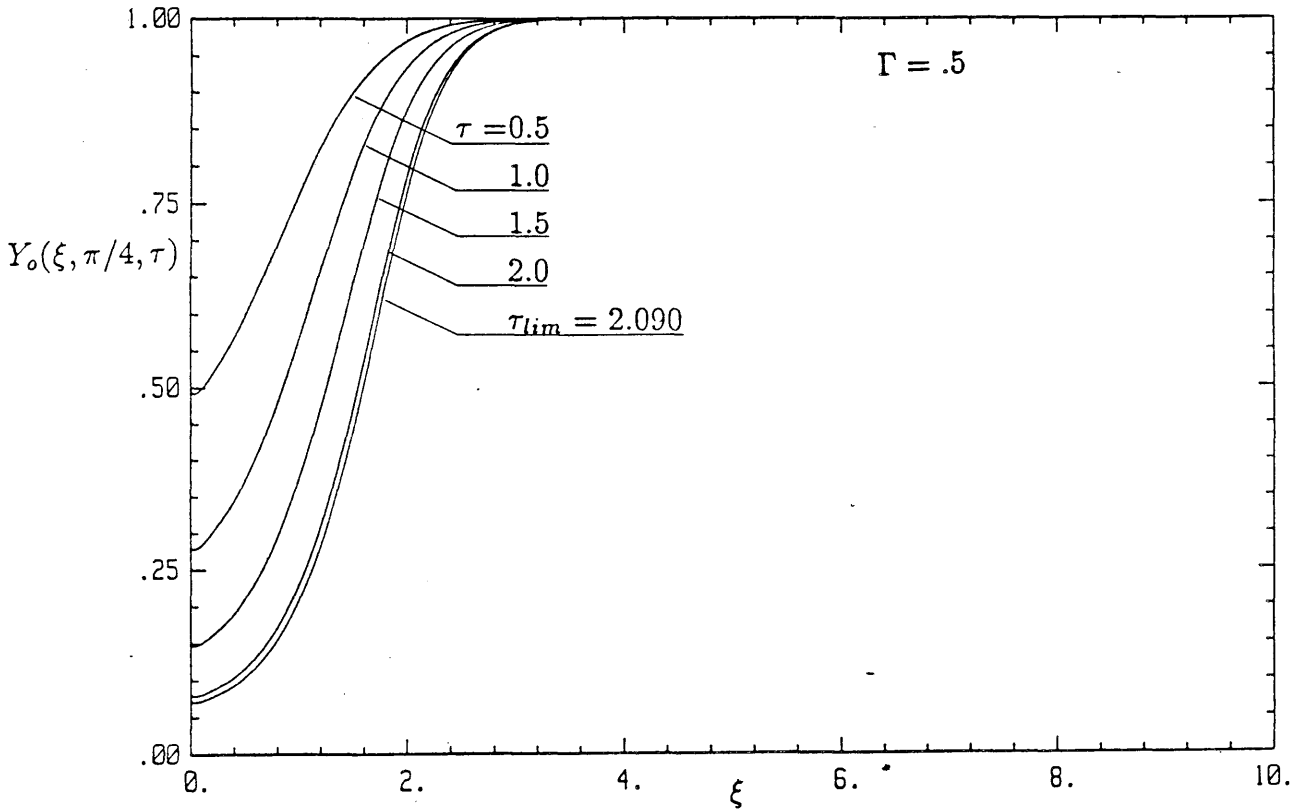


Figura 6.18.b Perfiles de concentración de reactante en $\theta = \pi/4$ correspondientes a $\Gamma = .5$ para diversos tiempos.

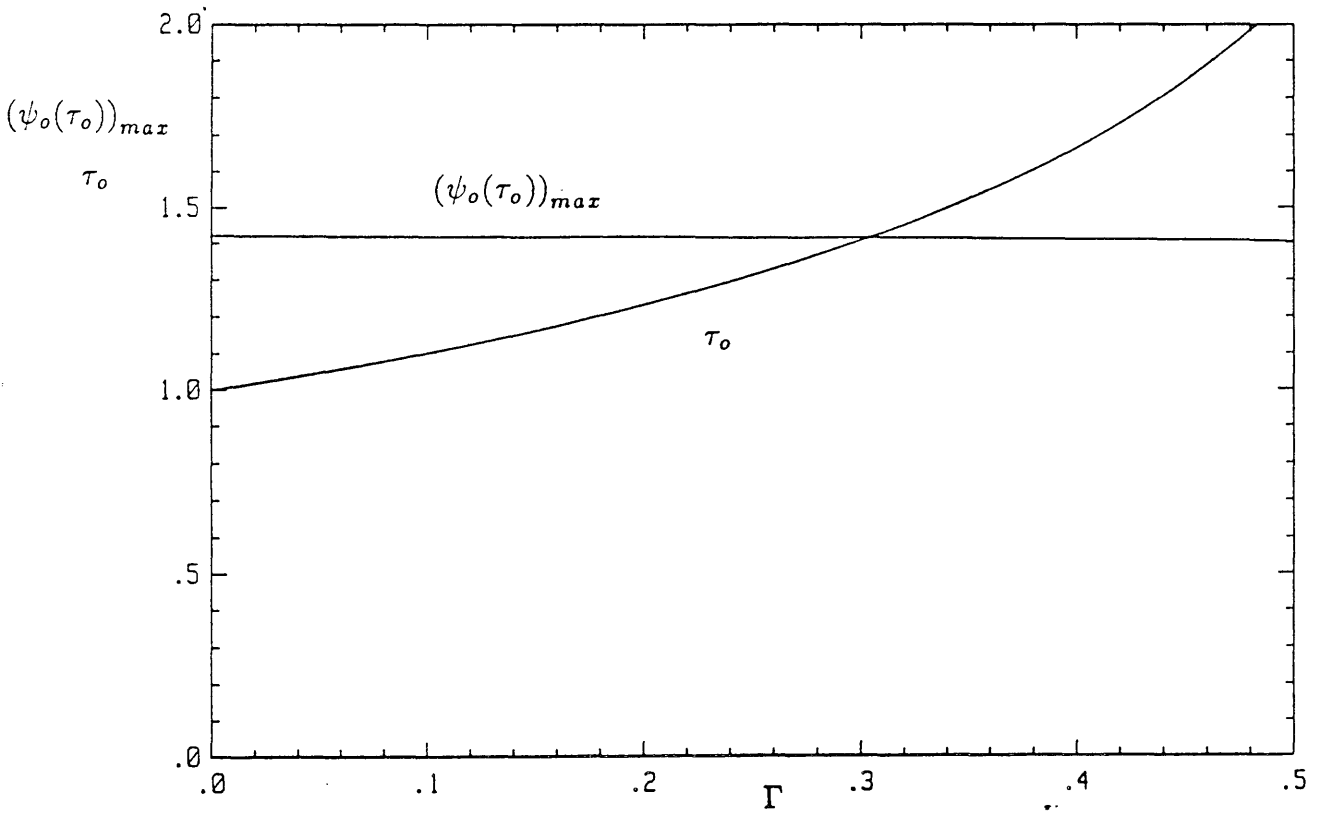


Figura 6.19 Valores de τ_0 e incrementos máximos de temperatura $\psi_0(\infty, \tau_0)$ en función de Γ .

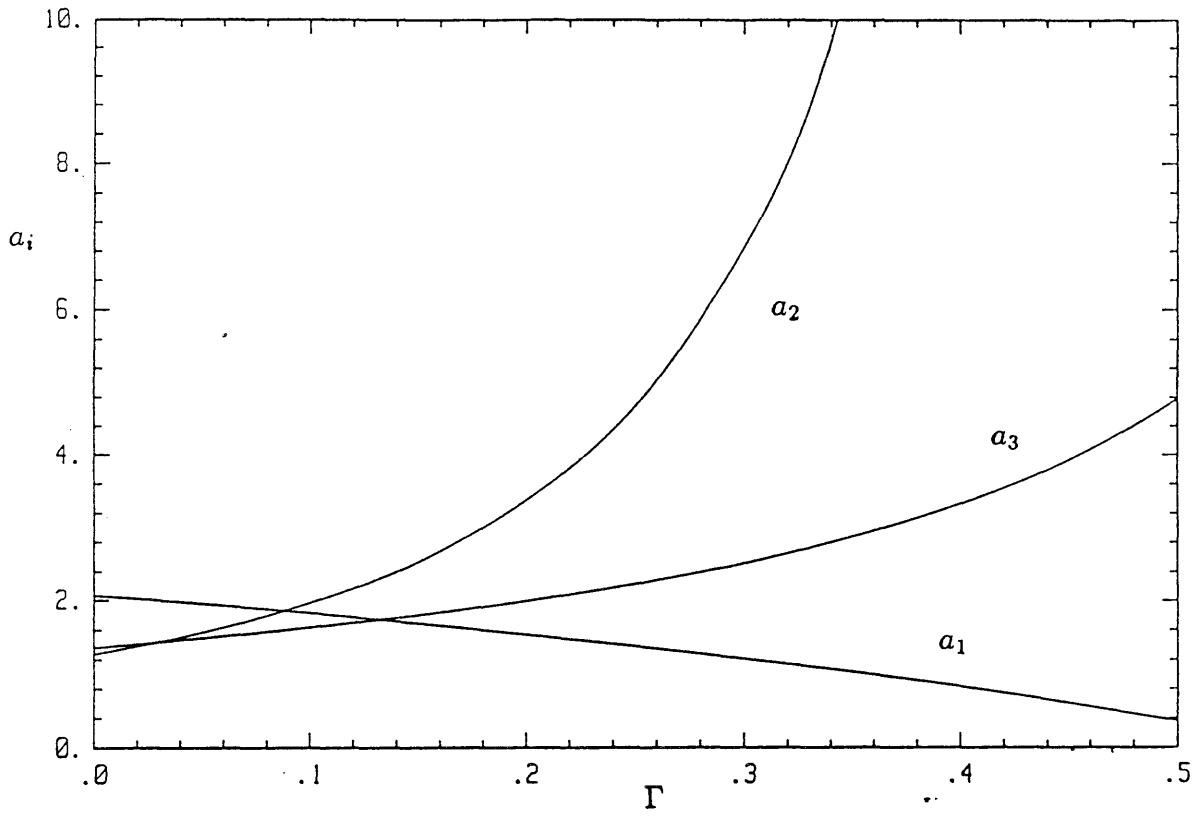


Figura 6.20 Coeficientes a_1 , a_2 , y a_3 en función de Γ .

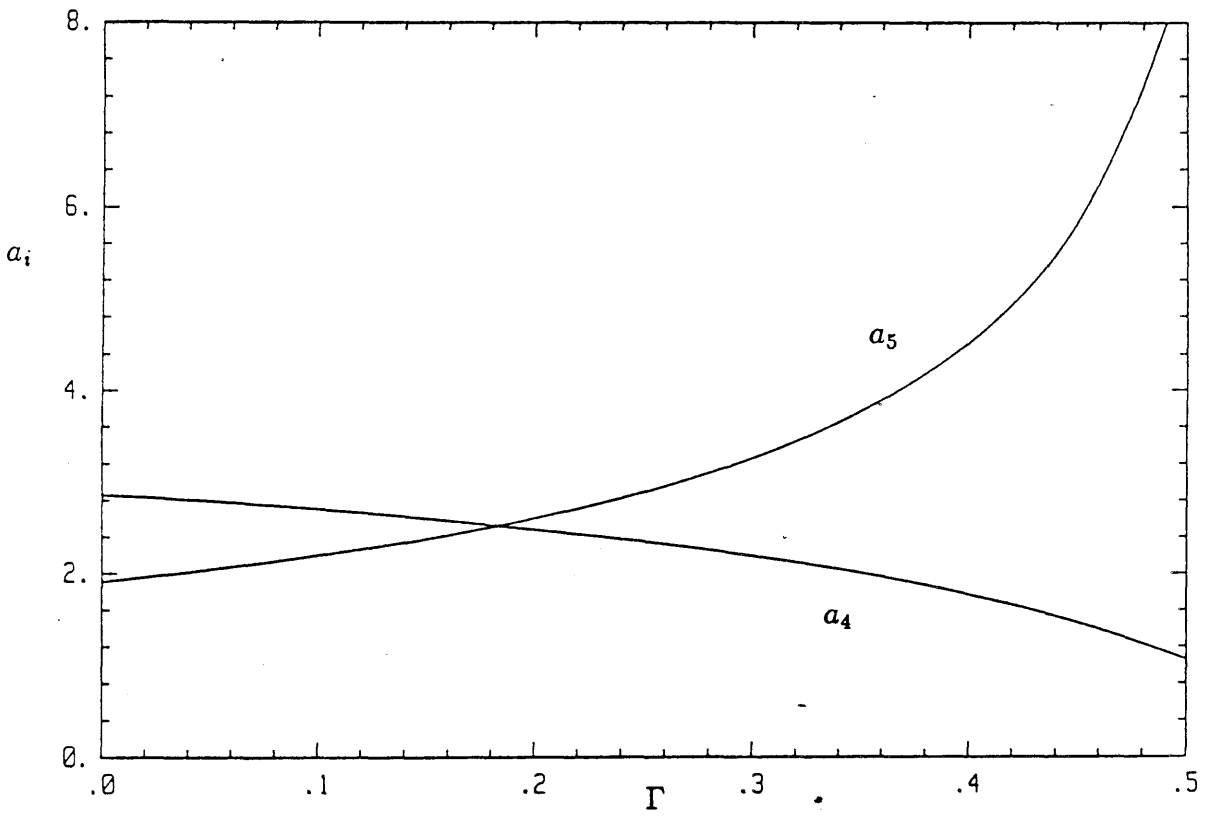


Figura 6.21 Coeficientes a_4 , y a_5 , en función de Γ .

APENDICE 6.1

RESOLUCION DE LA ECUACION INTEGRAL (6.47)

La ecuación integral no lineal

$$\sigma + g^2 + 2\ln(-\sigma) + b = \int_{-\infty}^{\sigma} \left(4 \frac{dg}{d\sigma'} - \frac{2}{\sqrt{-\sigma'}} \right) \frac{d\sigma'}{\sqrt{\sigma - \sigma'}} \quad (\text{A.6.1.1})$$

debe integrarse con la condición $g \sim -\sqrt{-\sigma}$ cuando $\sigma \rightarrow -\infty$. Además b debe ser tal que $g(\sigma)$ sea divergente en $\sigma = 0$.

Cuando $-\sigma \gg 1$ puede comprobarse que la solución es

$$g \sim -\sqrt{-\sigma} + (\ln(-\sigma) + b/2) / \sqrt{-\sigma}$$

Mediante el cambio $f = g + \sqrt{-\sigma}$ y $-\sigma = e^{-\xi}$ la ecuación (A.6.1.1) puede escribirse como:

$$4 \int_{-\infty}^{\xi} \frac{df}{d\xi'} \frac{d\xi'}{\sqrt{e^{-\xi'} - e^{-\xi}}} = f^2 - 2fe^{-\xi/2} - 2\xi + b$$

con $f \sim (b/2 - \xi) e^{\xi/2}$ cuando $\xi \rightarrow -\infty$.

Si descomponemos la integral como $\int_{-\infty}^{-k} + \int_{-k}^{\xi}$ y tomamos $k \gg 1$ la primera integral puede calcularse usando para f la expresión correspondiente a $\xi \rightarrow -\infty$ y cuyo valor es:

$$4 \int_{-\infty}^{-k} \frac{df}{d\xi'} \frac{d\xi'}{\sqrt{e^{-\xi'} - e^{-\xi}}} = \frac{8}{e^{-\xi}} \left[\left(\frac{b}{4} + \frac{k}{2} \right) \left(1 - \sqrt{1 - e^{-\xi-k}} \right) + \ln \left(1 - \sqrt{1 - e^{-\xi-k}} \right) - \ln 2 \right]$$

A partir de $x_0 = -k$ consideramos $x_i = x_{i-1} + h_{i-1}$ para $i = 1, 2, \dots$, donde h_{i-1} es constante inicialmente pero se va reduciendo conforme aumenta el valor de $f_{i-1} = f(x_{i-1})$ según $h_{i-1} \sim h_0/f_{i-1}$.

La integral entre $-k$ y $\xi = x_i$ puede expresarse como:

$$\int_{-k}^{\infty} = \sum_{j=1}^{i-1} \int_{x_{j-1}}^{x_j} + \int_{x_{i-1}}^{x_i}$$

Cada una de estas integrales puede discretizarse mediante:

$$\int_{x_{\ell-1}}^{x_\ell} \frac{df}{d\xi'} \frac{d\xi'}{\sqrt{e^{-\xi'} - e^{-x_i}}} \sim \frac{f_\ell - f_{\ell-1}}{h_{\ell-1}} \int_{x_{\ell-1}}^{x_\ell} \frac{d\xi'}{\sqrt{e^{-\xi'} - e^{-x_i}}}$$

Teniendo en cuenta que

$$\int \frac{d\xi'}{\sqrt{e^{-\xi'} - e^{-x_i}}} = 2e^{x_i/2} \arccos \left(e^{-(x_i - \xi')/2} \right)$$

se tiene:

$$\int_{x_{\ell-1}}^{x_\ell} = 2e^{x_i/2} \frac{f_\ell - f_{\ell-1}}{h_{\ell-1}} \left[\arccos \left(e^{-(x_i - x_{\ell-1})/2} \right) - \arccos \left(e^{-(x_i - x_\ell)/2} \right) \right]$$

de forma que la ecuación para calcular f_i es:

$$f_i^2 - 2b_i f_i + c_i = 0 \quad (\text{A.6.1.2})$$

donde

$$\begin{aligned} b_i &= e^{-x_i/2} + 4e^{x_i/2} \frac{1}{h_{i-1}} \arccos \left(e^{-h_{i-1}/2} \right) \\ c_i &= b - 2x_i - 8e^{x_i} \left[\left(\frac{b}{4} + \frac{k}{2} \right) d_i + \ln(1 - d_i/2) \right] - \\ &\quad 8e^{x_i/2} \sum_{j=1}^{i-1} \frac{f_j - f_{j-1}}{h_{j-1}} \left(\arccos \left(e^{-(x_i - x_{j-1})/2} \right) - \arccos \left(e^{-(x_i - x_j)/2} \right) \right) + \\ &\quad 8e^{x_i/2} (f_{i-1}/h_{i-1}) \arccos \left(e^{-h_{i-1}/2} \right) \\ d_i &= 1 - \sqrt{1 - e^{-x_i - k}} \end{aligned}$$

Fijados los valores de b y k y con $f_o = (b/2 + k)e^{-k/2}$ pueden calcularse mediante (A.6.1.2) el valor de f_i para $i = 1, 2, \dots$. De los dos valores posibles, f_i es aquél que verifica el requisito de continuidad de la función f .

La ecuación (A.6.1.1) se ha resuelto por el procedimiento indicado para distintos valores de b . Las distintas funciones g obtenidas se han representado en la figura A.6.1.1, encontrándose que si b es menor que un valor crítico, b_* , la solución no diverge, mientras que sí lo hace cuando $b > b_*$. Además la ecuación presenta una invariancia en el sentido siguiente: para cada b el valor de σ , σ_∞ , para el cual g (ó f) es divergente es tal que $\sigma_\infty + b$ es una constante, cuyo valor es precisamente b_* , el valor de b para el cual $\sigma_\infty = 0$, resultando ser $b_* = 5.123 \dots$.

Hay que señalar que en el curso del proceso de integración numérica de A.6.1. se ha observado que el valor de σ_∞ en el cual se produce la divergencia es muy sensible respecto del paso h_i a consecuencia, probablemente, de que los errores cometidos cuando f_i deja de ser de orden unidad se acumulan al calcular la integral entre $-k$ y x_{i-1} representada en la expresión para c_i por la suma desde $j = 1$ hasta $j = i - 1$. Este hecho motivó el uso de pasos no uniformes, haciendo en cierto sentido el método adaptativo, y puede explicar que en las primeras integraciones [LW3], que usaban paso uniforme, el valor obtenido fuese $b_* = 4.97$. La tendencia observada es que cuánto más pequeño es el paso se obtiene un valor de b_* ligeramente mayor.

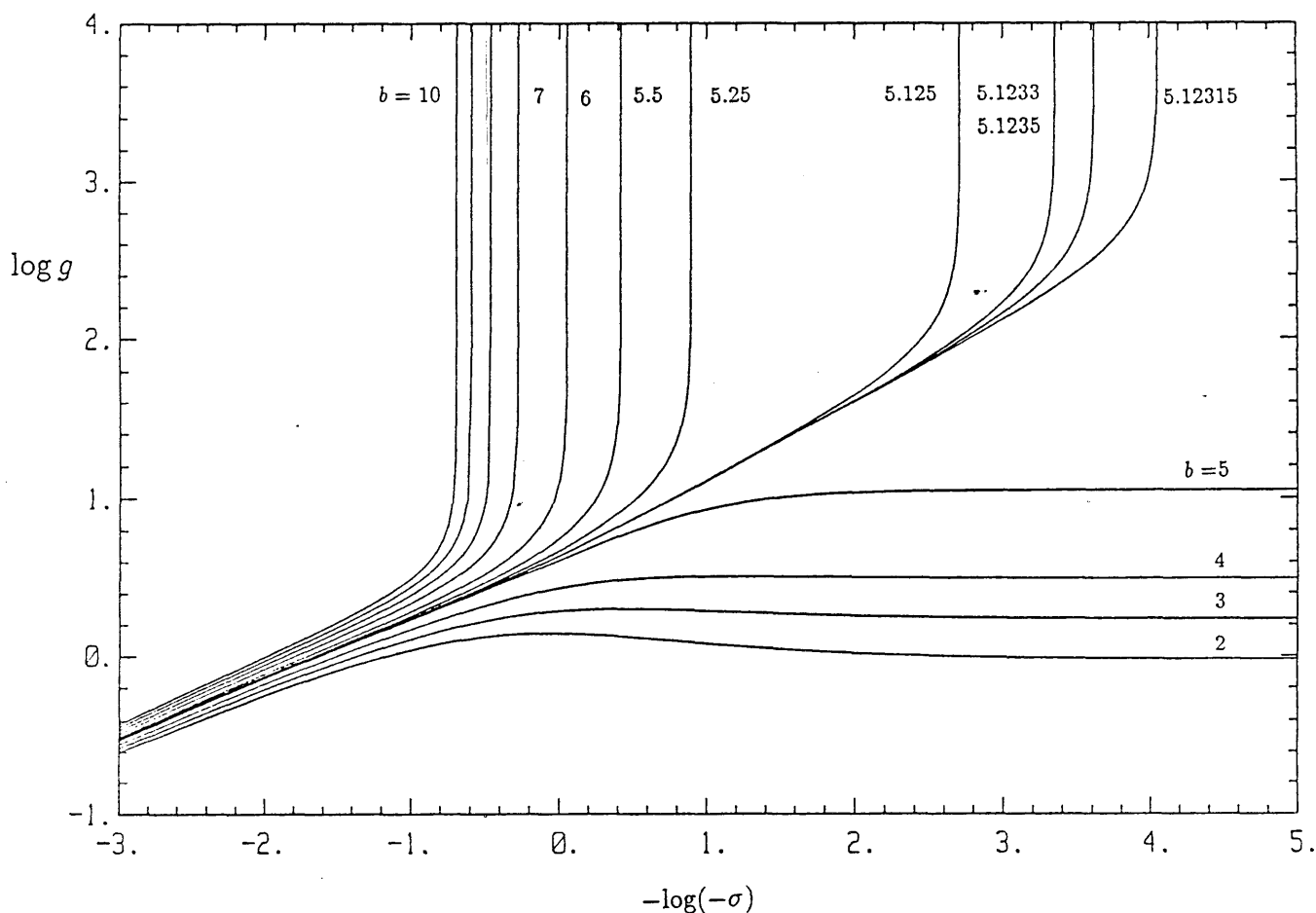


Figura A.6.1.1 Gráficas de las funciones g que se obtienen al integrar (A.6.1.1) para distintos valores de b

APENDICE 6.2

ESQUEMA NUMERICO PARA LA RESOLUCION DE 6.50

Las ecuaciones

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + \frac{\tau}{2} Y e^{\psi-\eta} = 0 \quad \psi(0, \tau) = \psi_\eta(\infty, \tau) = 0$$

$$\tau \frac{\partial Y}{\partial \tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y}{\partial \eta} + \gamma \frac{\tau}{2} Y e^{\psi-\eta} = 0 \quad Y(\eta, 0) = Y(\infty, \tau) = 1$$

forman un sistema de ecuaciones en derivadas parciales que están acopladas a través de las funciones pero no de sus derivadas. La primera ecuación es elíptica y no lineal, mientras que la segunda es hiperbólica y lineal.

Para cada valor de τ puede emplearse el método de Newton-Kantorovich de la siguiente forma. A partir de una aproximación inicial (ψ^0, Y^0) , se calcula una sucesión de funciones $(\psi^{\nu+1}, Y^{\nu+1})$ ($\nu = 0, 1, 2, \dots$) determinada mediante $\psi^{\nu+1} = \psi^\nu + \delta\psi^\nu$ e $Y^{\nu+1} = Y^\nu + \delta Y^\nu$ siendo $\delta\psi^\nu$ y δY^ν solución de los siguientes problemas lineales

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\partial^2 \delta\psi}{\partial \eta^2} - \frac{\tau}{2} Y e^{\psi-\eta} \delta\psi - \frac{\tau}{2} e^{\psi-\eta} \delta Y &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + \frac{\tau}{2} Y e^{\psi-\eta} \\ \delta\psi(0) &= \delta\psi_\eta(\infty) = 0 \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \tau \frac{\partial \delta Y}{\partial \tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial \delta Y}{\partial \eta} + \gamma \frac{\tau}{2} e^{\psi-\eta} [\delta Y + Y \delta\psi] &= -\tau \frac{\partial Y}{\partial \tau} + \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y}{\partial \eta} - \gamma \frac{\tau}{2} Y e^{\psi-\eta} \\ \delta Y(\infty) &= 0 \end{aligned} \right\}$$

donde para mayor claridad se han omitido los superíndices.

La discretización de estas ecuaciones se efectúa de un modo análogo al apéndice 3.4. Fijado un valor de η_∞ , el intervalo $[0, \eta_\infty]$ se transforma en el $[0, 1]$ mediante la variable x , definida por $\eta = e^{sx} - 1$ con $s = \ln(\eta_\infty + 1)$. En éste se establece una malla que consta de $n - 1$ puntos interiores, de forma que las coordenadas de los nodos son:

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = 1$$

A cada nodo interior x_i asignamos el intervalo cerrado $\Omega_i = [x_i - h_{i-1}/2, x_i + h_i/2]$ siendo $h_i = x_{i+1} - x_i$ ($i = 1, \dots, n$) con $h_n = 0$.

Multiplicando la ecuación de ψ por $se^{sx}dx$ e integrando sobre Ω_i se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$(a_o + a_1 - u_1)\delta\psi_1 + s_1\delta Y_1 - a_1\delta\psi_2 = p_1$$

$$-a_{i-1}\delta\psi_{i-1} + (a_{i-1} + a_i - u_i)\delta\psi_i + s_i\delta Y_i - a_i\delta\psi_{i+1} = p_i \quad (i = 2, \dots, n-1)$$

$$-a_{n-1}\delta\psi_{n-1} + (a_{n-1} - u_n)\delta\psi_n = p_n$$

donde

$$a_i = [sh_i k_i]^{-1}$$

$$k_i = \exp [s(x_i + h_i/2)]$$

$$u_i = \frac{\tau}{2} Y_i e^{\psi_i - \eta_i} (k_i - k_{i-1})$$

$$s_i = \frac{\tau}{2} e^{\psi_i - \eta_i} (k_i - k_{i-1})$$

$$p_1 = -(a_o + a_1)\psi_1 + a_1\psi_2 + u_1$$

$$p_i = a_{i-1}\psi_{i-1} - (a_{i-1} + a_i)\psi_i + a_i\psi_{i+1} + u_i \quad (i = 2, \dots, n-1)$$

$$p_n = a_{n-1}\psi_{n-1} - a_{n-1}\psi_n + u_n$$

Para discretizar la ecuación de Y procedemos de igual forma y empleamos las siguientes aproximaciones para $\partial Y/\partial \eta$ y $\partial Y/\partial \tau$:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial x} = -b_i Y_{i-1} + (b_i - c_i) Y_i + c_i Y_{i+1}$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = d Y_i + d^* Y_i^* + d^{**} Y_i^{**}$$

donde

$$b_i = \frac{h_i}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})}$$

$$c_i = \frac{h_{i-1}}{h_i(h_i + h_{i-1})}$$

$$d = \frac{2\tau - \tau^* - \tau^{**}}{(\tau - \tau^*)(\tau - \tau^{**})}$$

$$d^* = \frac{\tau - \tau^{**}}{(\tau - \tau^*)(\tau^* - \tau^{**})}$$

$$d^{**} = \frac{\tau - \tau^*}{(\tau^* - \tau^{**})(\tau - \tau^{**})}$$

siendo τ^* y τ^{**} ($\tau^{**} < \tau^* < \tau$) los dos valores inmediatamente anteriores a τ en que se dispone de las soluciones Y^* e Y^{**} . La estabilidad de este método implícito que emplea tres niveles de tiempo puede examinarse mediante el método clásico de von Neumann [FL1, pp.85-88] resultando ser, al menos localmente, incondicionalmente estable.

Las ecuaciones discretizadas son:

$$q_1 = \bar{u}_1 \delta \psi_1 + (1 - e_1 + f_1 + \bar{s}_1) \delta Y_1 - f_1 \delta Y_2$$

$$q_i = e_i \delta Y_{i-1} + \bar{u}_i \delta \psi_i + (1 + e_i + f_i + \bar{s}_i) \delta Y_i - f_i \delta Y_{i+1} \quad (i = 2, \dots, n-2)$$

$$q_{n-1} = e_{n-1} \delta Y_{n-2} + \bar{u}_{n-1} \delta \psi_{n-1} + (1 - e_{n-1} + f_{n-1} + \bar{s}_{n-1}) \delta Y_{n-1}$$

donde

$$e_i = \frac{1}{2\tau d} \left\{ \frac{1}{a} - \frac{h_i + h_{i-1}}{2(k_i - k_{i-1})} \right\} b_i$$

$$f_i = \frac{1}{2\tau d} \left\{ \frac{1}{a} - \frac{h_i + h_{i-1}}{2(k_i - k_{i-1})} \right\} c_i$$

$$\bar{u}_i = \frac{\gamma}{2d} Y_i e^{\psi_i - \eta_i}$$

$$\bar{s}_i = \frac{\gamma}{2d} e^{\psi_i - \eta_i}$$

$$q_i = - \{ e_i Y_{i-1} + (1 - e_i + f_i) Y_i - f_i Y_{i+1} + \bar{u}_i + \bar{d}^* Y_i^* + \bar{d}^{**} Y_i^{**} \}$$

$$\bar{d}^* = d^* / d$$

$$\bar{d}^{**} = d^{**} / d$$

En q_{n-1} debe incluirse la condición de contorno en $\eta = \infty$: $Y_n = 0$ y en q_1 el valor de Y_o es conocido e igual a $1 - \exp(-\gamma\tau/2)$.

Las n ecuaciones para ψ_1, \dots, ψ_n y $n-1$ para Y_1, \dots, Y_{n-1} constituyen un sistema de $2n-1$ ecuaciones que puede escribirse como:

$$M^\nu X^\nu = B^\nu$$

siendo X^ν el vector formado por las correcciones $\delta\psi_i^\nu$ y δY_i^ν :

$$(X^\nu)^T = (\delta\psi_1^\nu, \delta Y_1^\nu, \delta\psi_2^\nu, \delta Y_2^\nu, \dots, \delta\psi_{n-1}^\nu, \delta Y_{n-1}^\nu, \delta\psi_n^\nu)$$

y B^ν el vector formado por los términos independientes p_i^ν y q_i^ν :

$$(B^\nu)^T = (p_1^\nu, q_1^\nu, p_2^\nu, q_2^\nu, \dots, p_{n-1}^\nu, q_{n-1}^\nu, p_n^\nu)$$

que constituye el residuo del sistema de ecuaciones.

Los elementos de la matriz M no nulos son:

$$\begin{aligned} j = 2i - 1 \quad (i = 1, \dots, n) & \quad \begin{cases} m_{j,j-2} = -a_{i-1} \\ m_{j,j} = a_{i-1} + a_i - u_i \\ m_{j,j+1} = s_i \\ m_{j,j+2} = -a_i \end{cases} \\ j = 2i \quad (i = 1, \dots, n-1) & \quad \begin{cases} m_{j,j-2} = e_i \\ m_{j,j-1} = \bar{u}_i \\ m_{j,j} = 1 - e_i + f_i + \bar{s}_i \\ m_{j,j+2} = -f_i \end{cases} \end{aligned}$$

Al ser la matriz M^ν pentadiagonal el sistema $M^\nu X^\nu = B^\nu$ puede resolverse mediante el algoritmo de Thomas generalizado [FL1, pp.187-188]. Una vez calculadas las correcciones $\delta\psi^\nu$ y δY^ν se obtienen las nuevas aproximaciones $\psi^{\nu+1}$ e $Y^{\nu+1}$. A partir de ellas se obtiene el vector de residuos $B^{\nu+1}$, si la norma de éste es mayor que un cierto prefijado, ε_B , se calcula la matriz $M^{\nu+1}$. Las iteraciones se prosiguen hasta que $\|B^{\nu+1}\| < \varepsilon_B$ en cuyo caso $\psi^{\nu+1}$ e $Y^{\nu+1}$ se admiten como soluciones correspondientes al tiempo τ en que se está calculando.

Mediante las técnicas usuales de los métodos de continuación se calculan las aproximaciones iniciales $\psi^0(\eta, \tau + \Delta\tau)$ e $Y^0(\eta, \tau + \Delta\tau)$ con lo que se inicia un nuevo ciclo de iteraciones para calcular la solución en $\tau + \Delta\tau$. Uno de los aspectos más delicados del esquema numérico que estamos describiendo es la correcta elección del paso temporal $\Delta\tau$. Dado el carácter hiperbólico de la segunda ecuación, $\Delta\tau$ debe ser suficientemente pequeño para que $\partial Y_o / \partial \tau$ pueda ser aproximada adecuadamente mediante una discretización de diferencias finitas. Por otra parte, a causa del significado físico de la función ψ_o , solución de la ecuación elíptica, hay que esperar que su derivada temporal sea una una función creciente y no acotada. Para que el predictor inicial, con el cual se inicia el ciclo de iteraciones para cada valor de τ y que se determina mediante un procedimiento de continuación, sea una aproximación razonablemente buena de la solución,

y por tanto el método de Newton-Kantorovich converja, es necesario reducir el paso $\Delta\tau$ conforme aumenta la derivada temporal. Esta estrategia permite además calcular con suficiente precisión el valor máximo τ_o para el cual existe solución del anterior sistema de ecuaciones. Una vez conocidas las funciones $\psi_o(\eta, \tau)$ e $Y_o(\eta, \tau)$ en $\tau = \tau_1$, podría pensarse en emplear el valor de $\partial\psi_o(\infty, \tau)/\partial\tau$ para calcular el siguiente valor de $\Delta\tau$. Las dificultades, ya señaladas, que se encuentran al resolver las ecuaciones cuando γ es moderadamente grande hacen conveniente emplear la derivada temporal de la función $\tilde{\psi}(\eta, \lambda)$, introducida en la ecuación (6.55), que representa la distribución de temperatura existente en $\tau = \lambda\tau_1$ si la concentración de reactante, $y_o(\eta)$, es independiente de τ e igual a $Y_o(\eta, \tau_1)$. Por tanto $\tilde{\psi}$ es solución de

$$\frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial \eta^2} + \lambda \frac{\tau_1}{2} y_o e^{\tilde{\psi} - \eta} = 0; \quad \tilde{\psi}(0, \lambda) = \tilde{\psi}_\eta(\infty, \lambda) = 0$$

y su derivada temporal es $\partial\tilde{\psi}/\partial\tau = (\partial\tilde{\psi}/\partial\lambda)/\tau_1$, siendo $\tilde{\psi}_\lambda$ solución de

$$\frac{\partial^2 \tilde{\psi}_\lambda}{\partial \eta^2} + \lambda \frac{\tau_1}{2} y_o e^{\tilde{\psi} - \eta} \tilde{\psi}_\lambda = \frac{\tau_1}{2} y_o e^{\tilde{\psi} - \eta}; \quad \tilde{\psi}_\lambda(0, \lambda) = (\tilde{\psi}_\lambda)_\eta(\infty, \lambda) = 0$$

El valor de $\tilde{\psi}_\tau$ en τ_1 se obtiene cuando $\lambda = 1$, y al ser $\tilde{\psi}(\eta, 1) = \psi_o(\eta, \tau_1)$ el problema que debe resolverse es:

$$\frac{\partial^2 \tilde{\psi}_\lambda}{\partial \eta^2} + \frac{\tau_1}{2} Y_o(\eta, \tau_1) e^{\psi_o(\eta, \tau_1) - \eta} \tilde{\psi}_\lambda = -\frac{\tau_1}{2} y_o e^{\psi_o(\eta, \tau_1) - \eta}; \quad \tilde{\psi}_\lambda(0, 1) = (\tilde{\psi}_\lambda)_\eta(\infty, 1) = 0$$

En consecuencia después de calcular $\psi_o(\eta, \tau_1)$ e $Y_o(\eta, \tau_1)$ se obtiene $\tilde{\psi}_\lambda(\infty, 1)$ resolviendo el problema anterior y el nuevo paso temporal puede, por ejemplo, determinarse mediante $\Delta\tau \sim 1/\tilde{\psi}_\lambda(\infty, 1)$. La figura A.6.2.1 muestra, en el caso $\gamma = 10$, las gráficas de $\psi_o(\infty, \tau)$ y $\tilde{\psi}(\infty, \tau/\tau_1)$ para distintos τ_1 . En las proximidades de $\tau_o = 4.46 \dots$ $\psi_{o,\tau}$ es de orden unidad pero $\tilde{\psi}_\lambda$ es muy grande, de manera que el esquema numérico empleará pasos de tiempo muy pequeños.

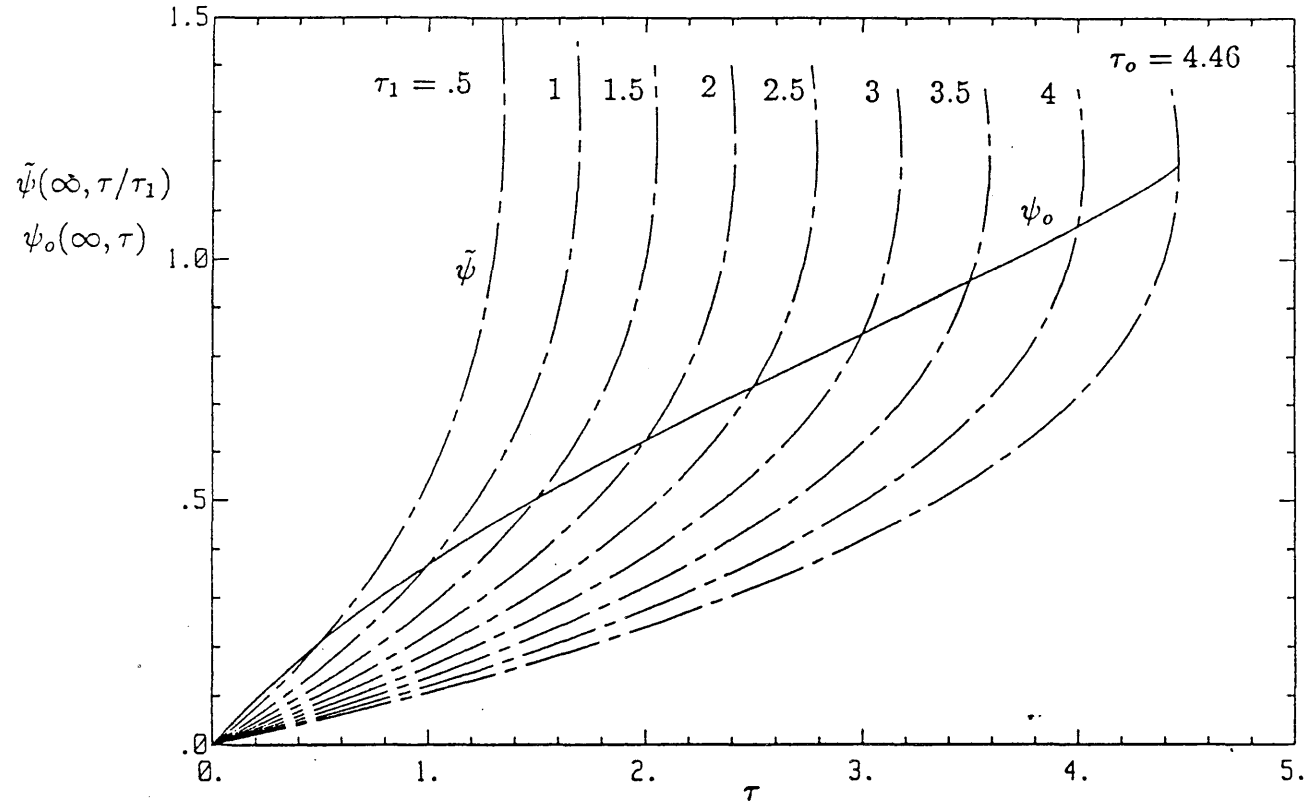


Figura A.6.2.1 Gráficas de $\psi_o(\infty, \tau)$ y $\tilde{\psi}(\infty, \tau/\tau_1)$.

APENDICE 6.3

SOLUCION DEL PROBLEMA (6.90)

Las ecuaciones

$$\Delta\psi_o + D\tau Y_o \exp\left(\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \text{sen}2\theta\right) = 0 \quad (\text{A.6.3.1a})$$

$$\psi_o(\xi, 0, \tau) = \psi_{o,\theta}(\xi, \pi/4, \tau) = \psi_{o,\xi}(\infty, \theta, \tau) = 0 \quad (\text{A.6.3.1b})$$

$$\tau \frac{\partial Y_o}{\partial \tau} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial Y_o}{\partial \xi} + \Gamma D \tau Y_o \exp\left(\psi_o - \frac{1}{2}\xi^2 \text{sen}2\theta\right) = 0 \quad (\text{A.6.3.1c})$$

$$Y_o(\xi, \theta, 0) - 1 = Y_o(\infty, \theta, \tau) - 1 = 0 \quad (\text{A.6.3.1d})$$

son de estructura similar a (6.50) pero poseen una mayor complejidad a consecuencia del procedimiento que se requiere para imponer correctamente las condiciones de contorno en $\xi = \infty$ y de la existencia de una capa límite en $\xi \gg 1$, $\theta \ll 1$.

a) Solución en $\tau \ll 1$

Para comenzar la integración de estas ecuaciones es necesario conocer su solución en $\tau \ll 1$. Esta puede ponerse como $\psi_o = \tau\psi_{01}(\xi, \theta) + o(\tau)$ e $Y_o = 1 - \tau Y_{01}(\xi, \theta) + o(\tau)$, encontrándose para ψ_{01} e Y_{01} los siguientes problemas lineales:

$$\begin{aligned} \Delta\psi_{01} &= -De^{-\frac{1}{2}\xi^2 \text{sen}2\theta}; & \psi_{01}(\xi, 0) &= \psi_{01,\theta}(\xi, \pi/4) = \psi_{01,\xi}(\infty, \theta) = 0 \\ Y_{01} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial Y_{01}}{\partial \xi} &= \Gamma De^{-\frac{1}{2}\xi^2 \text{sen}2\theta}; & Y_{01}(\infty, \theta) &= 0 \end{aligned}$$

La solución del primero ha sido analizada en el apéndice 3.2 y la del segundo es

$$Y_{01} = \Gamma D E_2 \left(\frac{1}{2} \xi^2 \text{sen}2\theta \right)$$

con lo cual

$$Y_o = 1 - \tau \Gamma D E_2 \left(\frac{1}{2} \xi^2 \text{sen}2\theta \right) \quad (\tau \ll 1) \quad (\text{A.6.3.2})$$

b) Solución en la capa límite

Cuando $\xi \sim \xi_\infty \gg 1$ la temperatura inerte congela la reacción química excepto en una capa próxima a $\theta = 0$ en la cual $\frac{1}{2}\xi^2 \sin 2\theta = \mathcal{O}(1)$. Para estudiar esta capa límite tomamos las mismas variables que en el capítulo 3:

$$\xi = \xi_\infty \eta, \quad \theta = x/\xi_\infty^2, \quad \psi_o = V/\xi_\infty^2$$

que llevados a (A.6.3.1) y haciendo $\xi_\infty \rightarrow \infty$ dan lugar a:

$$\begin{aligned} \tau \frac{\partial Y_o}{\partial \tau} - \frac{\eta}{2} \frac{\partial Y_o}{\partial \eta} + \Gamma D Y_o \tau e^{-\eta^2 x} &= 0; & Y_o(\eta, x, 0) = Y_o(\eta, \infty, \tau) &= 1 \\ \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \eta^2 D Y_o \tau e^{-\eta^2 x} &= 0; & V(\eta, 0, \tau) = V_x(\eta, \infty, \tau) &= 0 \end{aligned}$$

Las condiciones de contorno en $x \rightarrow \infty$ son consecuencia del acoplamiento con las soluciones en $\xi \sim \xi_\infty$ y $\theta \sim 1$. La ecuación para Y_o puede integrarse obteniéndose

$$Y_o = \exp [-\Gamma D \tau E_2(\eta^2 x)] \quad (\text{A.6.3.3})$$

que llevada a la ecuación para V da lugar a:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -D \eta^2 \tau \exp [-\eta^2 x - \Gamma D \tau E_2(\eta^2 x)] \quad (\text{A.6.3.4})$$

Teniendo en cuenta la condición $V_x(\eta, \infty, \tau) = 0$ al integrar una vez se tiene

$$\frac{\partial V(x=0)}{\partial x} = \int_0^\infty D \tau \exp [-\mu' - \Gamma D \tau E_2(\mu')] d\mu' \quad (\text{A.6.3.5})$$

siendo $\mu = \eta^2 x$. Con este valor y $V|_{x=0} = 0$, (A.6.3.4) puede integrarse numéricamente con τ y η fijos para calcular $V(\eta, \infty, \tau)$ que será una de las condiciones de contorno en el problema exterior ($\xi \gg 1, \theta \sim 1$).

Además es necesario determinar la función $\partial V / \partial \eta$ que es solución del problema:

$$\frac{\partial^2 V_y}{\partial x^2} = -2D\tau\eta [1 - \eta^2 x (1 - \Gamma D \tau E_1(\eta^2 x))] \exp [-\eta^2 x - D \Gamma E_2(\eta^2 x)]$$

$$V_\eta(\eta, 0, \tau) = (V_\eta)_x(\eta, \infty, \tau) = 0$$

Como (A.6.3.5) no depende de η , la última de las condiciones anteriores puede reemplazarse por $(V_\eta)_x(\eta, 0, \tau) = 0$.

Llamando $F_1 = V$, $F_2 = V_x$, $F_3 = V_\eta$ y $F_4 = (V_\eta)_x$ el sistema de ecuaciones a resolver en $\eta = 1$ es:

$$\begin{aligned}\dot{F}_1 &= F_2 \\ \dot{F}_2 &= -D\tau \exp(-x - \Gamma D\tau E_2(x)) \\ \dot{F}_3 &= F_4 \\ \dot{F}_4 &= -2D\tau [1 - x + x\Gamma D\tau E_1(x)] \exp(-x - \Gamma D\tau E_2(x))\end{aligned}\tag{A.6.3.6a}$$

con las condiciones iniciales:

$$F_1(0) = F_2(0) - D\tau \int_0^\infty \exp(-x - \Gamma D\tau E_2(x)) dx = F_3(0) = F_4(0) = 0 \tag{A.6.3.6b}$$

El efecto de la capa límite vuelve a ser modificar la temperatura que la solución exterior ($\xi \gg 1, \theta = \mathcal{O}(1)$) "ve" en $\theta = 0$ no siendo ya $\psi = 0$ sino la temperatura aparente determinada por:

$$\psi_o(0, \xi, \tau) = \psi_{cl}(\tau)/\xi^2 \tag{A.6.3.7}$$

donde $\psi_{cl}(\tau) = F_1(\infty, \tau)$.

La función $\partial\psi(\xi_\infty, \theta, \tau)/\partial\xi$ en los puntos de la capa límite puede calcularse a partir de la solución anterior mediante

$$\frac{\partial\psi_o(\xi_\infty, \theta, \tau)}{\partial\xi} = \frac{1}{\xi_\infty^3} F_3(x, \tau) \tag{A.6.3.8}$$

c) Solución en la región exterior

En $\xi \sim \xi_\infty$, $\theta = \mathcal{O}(1)$ la ecuación para Y_o es

$$\tau \frac{\partial Y_o}{\partial \tau} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial Y_o}{\partial \xi} = 0; \quad Y_o(\infty, \theta, \tau) = 1$$

cuya solución es $Y_o = 1$. Este resultado es consecuencia de no incluir la difusión de productos y reactantes.

La ecuación para la temperatura se reduce a la de Laplace con las siguientes condiciones de contorno:

$$\begin{aligned}\Delta\psi_o &= 0 \\ \psi_o(\xi_\infty, \theta, \tau) - g(\theta, \tau) &= \psi_o(\xi, 0, \tau) - \psi_{cl}(\tau)/\xi^2 = \\ \psi_{o,\theta}(\xi, \pi/4, \tau) &= \psi_o(\infty, \theta, \tau) = 0\end{aligned}$$

siendo $g(\theta)$ la temperatura que se obtiene al resolver el problema (A.6.3.1) en el dominio $]0, \xi_\infty[\times]0, \pi/4[$. Mediante las variables $U = \xi_\infty^2 \psi_o$ y $\eta = \xi/\xi_\infty$ y con $g_1 = g\xi_\infty^2$ el problema anterior es:

$$\Delta U = 0 \quad (\text{A.6.3.9a})$$

$$U(1, \theta, \tau) - g_1(\theta, \tau) = U(\eta, 0, \tau) - \psi_{cl}/\eta^2 = \quad (\text{A.6.3.9b})$$

$$U_\theta(\eta, \pi/4, \tau) = U_\eta(\infty, \theta, \tau) = 0$$

que es análogo al encontrado en el capítulo 3 y cuyo proceso de resolución se ha detallado en el apéndice A.3.3. Procediendo de idéntica manera se llega a:

$$\frac{\partial \psi_o(\xi_\infty, \theta, \tau)}{\partial \xi} = -\frac{2}{\xi_\infty^3} \left\{ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n a_n \sin \lambda_n \theta + \psi_{cl} \left[1 + 2\sin^2 \theta + \frac{2}{\pi} (2\theta \cos 2\theta - \sin 2\theta \ln(2\sin 2\theta)) \right] \right\} \quad (\text{A.6.3.10})$$

donde $\lambda_n = 2(2n-1)$ y a_n son los coeficientes del desarrollo de Fourier de la función $g_1(\theta, \tau) - \psi_{cl}(\tau)$ dados por

$$a_n(\tau) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \int_0^{\pi/4} (g_1(\theta, \tau) - \psi_{cl}(\tau)) \sin \lambda_n \theta d\theta$$

d) Solución en la región interior

Con los resultados anteriores el problema para la región $]0, \xi_\infty[\times]0, \pi/4[$ puede formularse como:

$$\Delta \psi_o + D\tau Y_o \exp \left[\psi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta \right] = 0 \quad (\text{A.6.3.11a})$$

$$\psi_o(\xi, 0, \tau) = \psi_{o,\theta}(\xi, \pi/4, \tau) = \psi_{o,\xi}(\xi_\infty, \theta, \tau) - \hat{\psi}_{o,\xi} = 0 \quad (\text{A.6.3.11b})$$

$$\tau \frac{\partial Y_o}{\partial \tau} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial Y_o}{\partial \xi} + \Gamma D\tau Y_o \exp \left[\psi_o - \frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta \right] = 0 \quad (\text{A.6.3.12a})$$

$$\tau \ll 1 : Y_o = 1 - \Gamma D\tau E_2 \left(\frac{1}{2} \xi^2 \sin 2\theta \right) \quad (\text{A.6.3.12b})$$

$$Y_o(\xi, 0, \tau) - e^{-\Gamma D\tau} = Y_o(\infty, \theta, \tau) - \exp \left[-\Gamma D\tau E_2(\xi_\infty^2) \right] = 0 \quad (\text{A.6.3.12c})$$

donde $\hat{\psi}_{o,\xi}$ está determinada por (A.6.3.8) si $\theta = \mathcal{O}(1/\xi_\infty^2)$ y por (A.6.3.10) cuando $\theta = \mathcal{O}(1)$.

Son necesarios, por tanto, dos procesos iterativos para resolver el problema (6.90). Por una parte el asociado a la ecuación no lineal (A.6.3.1a) y, por otra, el derivado de trasladar la condición de contorno (A.6.3.1b) en $\xi = \infty$ a $\xi = \xi_\infty$. Al igual que en el capítulo 3, el primero se genera mediante el método de Newton-Kantorovich y el segundo consiste en resolver A.6.3.12a con una función $\hat{\psi}_{o,\xi}$ dada, obteniendo la función $g(\theta, \tau)$, y con ésta calcular de nuevo $\hat{\psi}_{o,\xi}$ a través de (A.6.3.10), repitiendo el proceso hasta que se produzca la convergencia.

La discretización de los problemas (A.6.3.11) y (A.6.3.12) se efectúa de manera análoga a lo ya expuesto en los apéndices 6.2 y 3.4 respectivamente. Evidentemente al discretizar (A.6.3.12) el valor de τ es un dato a diferencia del procedimiento seguido en el capítulo 3 donde se consideraba la norma de ψ como dato y se calculaba el valor de τ correspondiente.

El paso de tiempo se determina del mismo modo que al resolver el problema unidimensional, es decir, suponiendo que Y_o se mantiene constante se calcula la derivada temporal de ψ_o , $\tilde{\psi}_\lambda$, y se toma $\Delta\tau \sim 1/\text{máx}(\tilde{\psi}_\lambda)$.

CAPITULO 7

RESUMEN Y FUTURAS PERSPECTIVAS

Hemos analizado, mediante técnicas asintóticas basadas en grandes energías de activación, el proceso de ignición producido por el aumento brusco de la temperatura superficial en sólidos cuya superficie no es plana. Si caracterizamos la forma geométrica de ésta mediante la curvatura, las situaciones consideradas corresponden a valores del radio de curvatura relativo a la longitud típica del sólido de orden unidad y al caso límite en que el radio de curvatura es nulo, lo que puede asimilarse a la presencia de una singularidad en la superficie del sólido.

Cuando la temperatura superficial pasa de T_o , valor inicial de la temperatura del sólido, a T_s se genera una onda térmica que comienza a propagarse hacia el interior del sólido, modificando la temperatura respecto de la inicial, dando lugar a lo que hemos denominado distribución inerte de temperatura. La distancia recorrida por la onda térmica define la capa de conducción en cuyo interior se encuentra la zona de reacción caracterizada por diferencias de temperatura respecto de la superficial, $T - T_s$, del orden de la de Frank-Kamenetskii, RT_s^2/E , cuyo espesor es pequeño frente al de la capa de conducción por verificarse la hipótesis de Zeldovich: $1/\epsilon = E(T_s - T_o)/RT_s^2 \gg 1$. A consecuencia de lo cual la ecuación de la energía correspondiente a la zona de reacción, que describe el incremento de temperatura respecto de la inerte, está libre, en primera aproximación, de los efectos no estacionarios, que se encuentran asociados a la distribución inerte de temperatura. Por tanto la capa de reacción, delgada frente a la de conducción, es cuasiestacionaria. Si además suponemos que el número de Damköhler D_a , definido como la relación entre el tiempo químico de explosión homogénea y el de conducción, es grande frente a la unidad también es delgada frente al tamaño del sólido.

Inicialmente hemos considerado que el sólido es semiinfinito en ambas configuraciones geométricas, lo que es equivalente a suponer que el espesor de la capa de conducción es pequeño frente al tamaño del sólido y que, por tanto, el tiempo de

ignición es pequeño frente al de conducción. Mediante estimaciones de órdenes de magnitud hemos encontrado que las condiciones para que esta hipótesis sea aceptable es $\varepsilon^2 D_a \gg 1$ cuando la superficie es casi plana y $\varepsilon D_a \gg 1$ cuando tiene aristas. Estos valores pueden compararse con el valor crítico de orden unidad, por encima del cual no existe solución estacionaria del problema de Frank-Kamenetskii.

En el primer caso la ecuación de la zona de reacción es formalmente idéntica a la del caso plano, con lo cual la curvatura no influye directamente en la estructura de esta zona. Su efecto se refleja en la distribución inerte de temperatura y en la definición de las variables de semejanza, que son diferentes de las del caso plano. Cuando el radio de curvatura es nulo los efectos geométricos modifican la estructura de la zona de reacción que pasa a ser bidimensional.

Los problemas resultantes son análogos al de Frank-Kamenetskii y en ellos la nueva variable temporal desempeña el papel del número de Damköhler. Al estar definidos en dominios no acotados es necesario dar condiciones de contorno en el infinito, que deben deducirse al efectuar el "matching" con la solución en la zona de conducción no estacionaria. Al igual que en la teoría de explosiones térmicas de Frank-Kamenetskii, no existe solución cuasiestacionaria para la distribución de temperatura en la zona de reacción a partir de un valor máximo de la variable temporal, el cual constituye una primera aproximación para calcular el tiempo de ignición.

Cuando la superficie del sólido es casi plana, es moderadamente sencillo obtener las soluciones cuasiestacionarias y determinar el tiempo de ignición, pues se dispone de expresiones analíticas. En cambio el problema asociado a la esquina debe resolverse numericamente, para lo cual es necesario desarrollar un método que permita imponer correctamente las condiciones de contorno en el infinito, transfiriéndolas a una posición finita, y que incluya el efecto de la capa límite que aparece en la superficie del sólido.

Los efectos geométricos reducen el tiempo de ignición en ambos casos, pero de un modo diferente en cada uno. Si el radio de curvatura es de orden unidad el tiempo de ignición disminuye en una cantidad proporcional a $1/R\sqrt{\varepsilon^2 D_a}$, manteniéndose el mismo orden de magnitud que en el caso plano, mientras que cuando es nulo se cambia el orden de magnitud en un factor de ε . Al final de la etapa cuasiestacionaria los efectos no estacionarios no pueden despreciarse, lo que da lugar a una etapa de transición cuyo

análisis nos ha permitido obtener una mejor aproximación de los tiempos de ignición.

El método desarrollado para el estudio de la ignición en una esquina ha sido empleado posteriormente en configuraciones geométricas distintas, pero que presentaban también singularidades en la superficie: sólidos bidimensionales en forma de cuña cuyo ángulo no es recto y conos, como ejemplo de situaciones tridimensionales. Para estos sólidos se han determinado los tiempos de ignición en función del ángulo en el vértice que es el parámetro geométrico característico.

En ambos casos cuando el ángulo en el vértice es pequeño o próximo a π , el modelo deja de ser válido a consecuencia de que el tiempo característico de ignición cambia de orden de magnitud respecto de $t_c = t_q/\varepsilon$, que es el correspondiente a la esquina y que se utilizó para la adimensionalización de las ecuaciones. La ignición bidimensional se transforma en explosión térmica si el sólido tiene forma de aguja, pues entonces $t_c \sim t_q$, o en ignición unidimensional cuando el ángulo es próximo a π , ya que $t_c \sim t_q/\varepsilon^2$.

El análisis de la ignición de sólidos finitos debe realizarse por métodos diferentes dependiendo del valor del número de Damköhler. Cuando éste es mucho mayor que la unidad la ignición se produce en una capa delgada próxima a la superficie, desde la cual el sólido aparece como infinito. Mediante el empleo de la distribución de temperatura inerte apropiada y una adecuada redefinición de las variables de semejanza en la zona de reacción, la ecuación para ésta puede reducirse a uno de los tipos analizados anteriormente, pudiéndose aplicar los resultados referentes al valor crítico de la variable temporal. De esta forma hemos determinado la relación entre el tiempo de ignición y los parámetros geométricos y fisico-químicos para esferas, cilindros y sólidos de sección rectangular. Si se verifica que el parámetro $\varepsilon^2 D_a$, en el caso de cilindros y esferas y en general en sólidos con superficies regulares, ó εD_a , cuando existen aristas como en el caso rectangular, es grande frente a la unidad la capa de conducción es delgada frente al tamaño del sólido, con lo cual el tiempo de ignición es pequeño frente al de conducción, y son directamente aplicables los resultados de los capítulos 2 y 3. En cambio si $\varepsilon^2 D_a$ ó εD_a , respectivamente, son de orden unidad se obtiene una relación entre la definición de la variable temporal y su valor crítico en la que interviene la función $A(\tau, \ell)$ ó $B_j(\tau)$, deducida de la solución inerte, y que permite determinar el tiempo de ignición, que ahora es del orden del de conducción.

Si el número de Damköhler es de orden unidad la zona de reacción no está localizada en una capa superficial sino que es una región cuyo tamaño es comparable al del sólido y no puede tratarse como una capa límite. El análisis asintótico muestra la existencia de una etapa previa de calentamiento, en la cual la reacción está congelada y que finaliza cuando la temperatura difiere de la superficial en cantidades de orden ε . La duración de esta etapa puede determinarse a partir de la solución inerte obteniéndose un tiempo que depende de ε pero que es independiente del número de Damköhler y cuyo orden de magnitud relativo al de conducción es $\ln(1/\varepsilon)$, que es moderadamente grande frente a la unidad. En la etapa posterior, que constituye la de ignición propiamente dicha y en la que el único parámetro que interviene es el número de Damköhler, el tiempo necesario para alcanzar el punto de ignición se obtiene integrando numericamente la ecuación de la energía, considerando como condiciones iniciales las correspondientes al final de la etapa de calentamiento. De esta forma el tiempo de ignición adimensional puede expresarse como la suma de dos tiempos, cada uno de ellos dependiente de un parámetro distinto: ε y D_a .

El efecto del consumo de reactante ha sido incluido en el análisis de la ignición en el caso plano y en la esquina. Se ha estudiado en primer lugar un modelo simplificado consistente en suponer que el sistema es homogéneo. El resultado más significativo es la existencia de un valor crítico de γ tal que para valores más grandes no se produce la ignición a causa del agotamiento del reactante disponible. Los modelos no homogéneos han sido analizados considerando el rango de valores del parámetro que caracteriza la importancia del efecto del consumo de combustible, γ (unidimensional) y Γ (bidimensional), tales que el parámetro Γ_c , correspondiente a la explosión térmica y relacionado con γ y Γ mediante $\Gamma_c = \pi\varepsilon^2\gamma = \pi\varepsilon\Gamma$, verifique $\Gamma_c \ll 1$.

Cuando los parámetros γ y Γ son pequeños frente a la unidad, que es el caso usual en la literatura, la ecuación de la energía está desacoplada de la ecuación para la conservación de la fracción másica del reactante, de manera que en primera aproximación el valor del tiempo de ignición no se modifica por el consumo del reactante. Sólo cuando se incluyen los efectos no estacionarios en la etapa de transición el tiempo de ignición cambia con respecto al caso $\gamma = 0$ ó $\Gamma = 0$, siendo la corrección introducida proporcional al valor del parámetro.

En el modelo unidimensional si γ es de orden unidad se obtiene que tanto los tiempos de ignición determinados con la hipótesis cuasiestacionaria como la extensión

de la etapa de transición, en la cual se incluyen los efectos no estacionarios, son crecientes con γ . Durante el período de ignición se consume una cantidad apreciable de reactante apareciendo un frente de reacción a consecuencia del agotamiento local de combustible. Cuando $\gamma = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$ el incremento de temperatura ψ es de orden $1/\gamma$ y aumenta muy lentamente durante una etapa larga en la cual la cinética no incluye el factor exponencial, que sólo entra en juego cuando ψ se haga de orden unidad pudiendo entonces producirse la ignición. El consumo de reactante es más importante que en el caso anterior generándose un frente de reacción análogo. Este régimen podría evolucionar, cuando γ fuese suficientemente grande, hacia otro en el que no hay ignición sino combustión lenta del reactante. Los resultados correspondientes al modelo bidimensional son en cierto sentido semejantes, pero los rangos $\gamma = \mathcal{O}(1)$ y $\gamma = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$ aparecen como uno sólo correspondiente a $\Gamma = \mathcal{O}(1)$. Si Γ es moderadamente pequeño frente a la unidad la ignición se retrasa, al igual que ocurría cuando $\gamma = \mathcal{O}(1)$, y cuando Γ es mayor aparecen dificultades en el esquema numérico aunque los resultados tienen cierta similitud a los obtenidos cuando $\gamma = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$. Las dificultades numéricas, que ya surgieron en el modelo unidimensional cuando γ era moderadamente grande frente a la unidad, podrían estar asociados al carácter pulsante de la propagación de llamas en sólidos, para cuya descripción los modelos resultantes del análisis asintótico no son apropiados, pues no contienen términos no estacionarios en la ecuación de la energía. En cualquier caso, el efecto de concentración de calor debido a la esquina da lugar a que se reduzcan sensiblemente el período de tiempo y el consumo de reactante necesarios para producir la ignición. En particular si $\Gamma/\varepsilon = \gamma$ es de orden unidad, tanto el retraso en la ignición como la cantidad de combustible consumida son de orden unidad en el caso plano, mientras que son de orden ε en la esquina.

El análisis de los modelos que incluyan los efectos no estacionarios desde el comienzo del proceso en los casos unidimensional o de esquina, con $\gamma = \mathcal{O}(1/\varepsilon)$ y $\Gamma = \mathcal{O}(1)$ respectivamente, aparece como una de las posibles continuaciones naturales de este trabajo. Como resultado del mismo parece razonable esperar que pueda determinarse la naturaleza de los regímenes de combustión correspondientes, así como mostrar el carácter inestable o no de la propagación del frente de reacción.

En la condición de contorno que hemos utilizado la temperatura superficial aumenta bruscamente y después se mantiene constante de modo indefinido. Pudiera ser de interés determinar el tiempo mínimo que es necesario mantener la superficie a

la temperatura T_s para producir la ignición. Para estudiar esta cuestión deberíamos considerar el modelo no estacionario con la condición de contorno $T = T_s$ si $0 < t \leq t_s$, y $T = T_o$ si $t > t_s$, obteniendo la respuesta del sistema para distintos t_s y distintos Γ_c , incluyendo el caso $\Gamma_c = 0$.

La ignición producida por otros procedimientos puede también analizarse mediante técnicas asintóticas. En particular hemos realizado ya el análisis de la ignición en una esquina cuando el estímulo exterior es un flujo de calor constante. La resolución de este problema, que no incluye el consumo de reactante, es bastante más sencilla que la del abordado en esta tesis, de hecho no es necesario ningún tipo de cálculo numérico. Los resultados analíticos obtenidos, que se someterán a publicación en breve, concuerdan con los numéricos de Hermance y Vorsteveld [HV] con consumo de reactante cuando el parámetro γ es pequeño.

Uno de los problemas más interesantes que pueden considerarse en relación con el trabajo realizado hasta ahora es la continuación del análisis de la ignición en una esquina a partir de la etapa de transición, es decir, el desarrollo del "hot-spot" y su posterior transformación en onda de combustión.

La generalización del estudio de la ignición en sólidos a mezclas gaseosas aparece también como un campo de notable interés. Esto supone incluir el efecto de la expansión del gas a consecuencia del aumento de temperatura y, por consiguiente, de la convección en la ecuación de la energía. En el caso unidimensional, como ya han señalado Liñán y Williams [LW4], es suficiente con reemplazar la variable espacial ξ por $\int_0^\xi (\rho/\rho_\infty) d\xi$, siendo ρ la densidad de la mezcla. Al considerar el caso bidimensional, y en particular la esquina, parece previsible que estos efectos sólo intervengan a la hora de determinar la distribución inerte de temperatura. Para ello hay que resolver las ecuaciones de Navier-Stokes lo que ya constituye un problema de notable dificultad. Como consecuencia de la expansión se produce un efecto de desplazamiento del fluido próximo a la pared que da lugar lejos de la esquina a velocidades aproximadamente constantes, pero que cerca de ésta, y debido nuevamente al efecto geométrico, son mucho mayores. Esto da lugar a que el transporte de calor por conducción hacia el interior del sólido se vea reforzado por el transporte convectivo, lo que suaviza aún más los gradientes de temperatura, aumentando la región donde la temperatura es muy próxima a la superficial y reduciéndose, en definitiva, el tiempo de ignición.

Finalmente podría estudiarse el proceso de ignición con cinéticas químicas más realistas modeladas con varias reacciones. Una situación particularmente interesante, que parece ser típica de la combustión de hidrocarburos, se da cuando la reacción que controla la producción de radicales, o especies intermedias que actúen como tales, es endotérmica.

REFERENCIAS

- [AB] ABRAMOWITZ, M. and STEGUN, I.A., Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, New York, 1965
- [ABM] AVERSON, A.E., BARZYKIN, V.V. and MERZHANOV, A.G., Laws of ignition of condensed explosive systems with perfect heat transfer at the surface and allowance for burnup, *Inzhenerno-Fizicheskii Zhurnal* **9**(1965), pp. 245-249.
- [AM] AMES, W.F., Nonlinear Partial Differential Equations in Engineering, Academic Press, New York, 1965
- [BC] BANK, R.E. and CHAN, T.F., PLTMGC: A multi-grid continuation program for parameterized nonlinear elliptic systems, *SIAM J. Sci.Stat. Comp.* **7**(1986), pp. 540-559
- [BL] BIRKHOFF, G and LYNCH, R.E., Numerical Solutions of Elliptic Problems, SIAM, Philadelphia, 1984.
- [BK] BEBERNES, J.W. and KASSOY, D.R., A mathematical analysis of blowup for thermal reactions - The spatially non-homogeneous case, *SIAM J. Applied Math.* **49**(1981), pp. 476-484.
- [BO] BOYD, J.P., An analytical and numerical study of the two-dimensional Bratu equation, *J. of Scientific Computing*, **1**(1986), pp. 183-206.
- [BW] BAZLEY, N.W. and WAKE, G.C., The dependence of criticality on activation energy when reactant consumption is neglected, *Combustion and Flame*, **33**(1978), pp. 161-168.
- [CJ] CARSLAW, H.S. and JAEGER, J.C., Conduction of Heat in Solids, 2nd Ed, Oxford University Press, Oxford, 1965.
- [CF] CARSLAW, H.S., Introduction to the Theory of Fourier's Series and Integrals, 3rd Ed, Dover Publications, New York, 1950.

- [CH] COURANT, R. and HILBERT, D., *Methods of mathematical physics, I*, Interscience, New York, 1955.
- [CK] CHAN, T.F. and KELLER, H.B., Arc-length continuation and multigrids techniques for nonlinear elliptic eigenvalue problems, *SIAM, J. Sci. Stat. Comp.*, **3**(1982), pp. 173–194.
- [DO] DOLD, J.W., Analysis of the early stage of thermal runaway, *Quart. J. of Mech&Appl. Math.*, **38**(1985), pp. 361–387.
- [FK] FRANK-KAMENETSKII, D.A., *Diffusion and Heat Transport in Chemical Kinetics*, Plenum Press, 1969.
- [FK1] FRANK-KAMENETSKII, D.A., The time-independent theory of thermal explosions, *Zh. Fiz. Khim.*, **13**:738(1939).
- [FL1] FLETCHER, C.A.J., *Computational Techniques for Fluid Dynamics, I*, Springer Series in Computational Physics, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [FL2] FLETCHER, C.A.J., *Computational Techniques for Fluid Dynamics, II*, Springer Series in Computational Physics, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [FO] FORNBERG, B., A numerical study of steady viscous flow past a circular cylinder, *J. Fluid Mech.*, **98**(1980), pp. 819–855.
- [FU] FUJITA, H., On the nonlinear equations $\Delta u + e^u = 0$ and $\partial v / \partial t = \Delta v + e^v$. *Bull. Am. Math. Soc.*, **75**(1969), pp. 132–135.
- [GR] GRADSHTEYN, I.S. and RYZHIK, I.M., *Table of Integrals Series and Products*, Academic Press, New York, 1983.
- [HE] HERMANCE, C.E., Ignition analysis of adiabatic, homogeneous systems including reactant consumption, *AIAA Journal* **11**(1973), pp. 1728–1731.
- [HV] HERMANCE, C.E. and VORSTEVELD, L.G., Effect of geometry on ignition of a reactive solid: square corner, *AIAA Journal*, **25**(1986), pp. 592–597.
- [KA1] KAPILA, A.K., Reactive-diffusive systems with Arrhenius kinetics: dynamics of ignition, *SIAM J. Applied Math.*, **39**(1980), pp. 21–36
- [KA2] KAPILA, A.K., Evolution of deflagration in a cold combustible subjected to

- a uniform energy flux, *Int. J. Engrg. Sci.*, **19**(1981), pp. 495–509.
- [KS1] KASSOY, D.R., Perturbation methods for mathematical models of explosion phenomena, *Quart. J. of Mech.&Appl. Math.* **28**(1975), pp. 63–74.
- [KS2] KASSOY, D.R., A theory of adiabatic, homogeneous explosion from initiation to completion, *Combustion, Science and Technology*, **10**(1975), pp. 27–35.
- [KS3] KASSOY, D.R., The supercritical spatially homogeneous thermal explosion: initiation to completion, *Quart. J. of Mech.&Appl. Math.* **30**(1977), pp. 71–89.
- [KC] KEVORKIAN, J. and COLE, J.D., *Perturbation Methods in Applied Mathematics*, Springer-Verlag, New York, 1981.
- [KE] KELLER, H.B., Numerical solution of bifurcation and nonlinear eigenvalue problems, in *Applications of Bifurcation Theory*, P. Rabinowitz ed., Academic Press, New York, 1977, pp. 359–384.
- [KL] KASSOY, D.R. and LIÑAN, A., The influence of reactant consumption on the critical conditions for homogeneous thermal explosions, *Quart. J. of Mech.&Appl. Math.*, **31**(1971), pp. 99–112.
- [KP1] KASSOY, D.R. and POLAND, J., The thermal explosion confined by a constant temperature boundary: I–The induction period solution, *SIAM J. Applied Math.*, **39**(1980), pp. 412–430.
- [KP2] KASSOY, D.R. and POLAND, J., The thermal explosion confined by a constant temperature boundary: II–The extremely rapid transient, *SIAM J. Applied Math.*, **41**(1981), pp. 231–246.
- [LK1] LIÑAN, A. and KINDELAN, M., Asymptotic techniques in ignition theory, Final Report for Grant No DA-ERO-79-6-007 US Army European Research Office, E.T.S.I Aeronáuticos, Madrid, (1980).
- [LK2] LIÑAN, A. and KINDELAN, M., Ignition of a reactive solid by an inert hot spot, *Progress in Astronautics and Aeronautics*, **76**(1981), pp. 412–426.
- [LP] LAPIDUS, L. and PINDER, G.F., *Numerical Solution of Partial Differential*

Equations in Science and Engineering, John Wiley & Sons, New York, 1982.

- [LW1] LIÑAN, A. and WILLIAMS, F.A., Theory of ignition of a reactive solid by constant energy flux, *Combustion, Science and Technology*, **3**(1971), pp. 91-98.
- [LW2] LIÑAN, A. and WILLIAMS, F.A., Radiant ignition of a reactive solid with in-depth absorption, *Combustion and Flame*, **18**(1972), pp. 85-97.
- [LW3] LIÑAN, A. and WILLIAMS, F.A., Ignition of a reactive solid exposed to a step in surface temperature, *SIAM J. Applied Math.*, **36**(1979), pp. 587-603.
- [LW4] LIÑAN, A. and WILLIAMS, F.A., Ignition by a hot catalytic surface, *SIAM J. Applied Math.*, **40**(1981), pp. 261-265.
- [MA] MERZHANOV, A.G. and AVERSON, A.E., The present state of the thermal ignition theory: an invited review, *Combustion and Flame*, **16**(1971), pp. 89-124.
- [MAG] MERZHANOV, A.G., ABRAMOV, V.G. and GONTKOVSKAYA, V.T., Characteristics of the transition for spontaneous combustion to ignition, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, (1963), pp. 148-156.
- [MMP] MIGNOT, F., MURAT, F. et PUEL, J.P., Variation d'un point de retournement par rapport au domaine, *Comm. in Partial Differential Equations*, **11**(1979), pp. 1263-1297.
- [MS] MATKOWSKY, B.J. and SIVASHINSKY, G.I., Propagation of a pulsating front in solid fuel combustion, *SIAM J. Applied Math.*, **35**(1978), pp. 465-478.
- [NW] NIIOKA, T. and WILLIAMS, F.A., Ignition of a reactive solid in a hot stagnation point flow, *Combustion and Flame*, **29**(1977), pp. 43-54.
- [PHK] POLAND, J., HINDASH, I.O., and KASSOY, D.R., Ignition processes in confined thermal explosions, *Combustion, Science and Technology*, **27**(1982), pp. 215-227.
- [PW] PROTTER, M.H. and WEINBERGER, H.F., *Maximum Principles in Differential Equations*, Springer-Verlag, New York, 1984.

- [OL] OLMSTEAD, W.E., Ignition of a combustible half space, *SIAM J. Applied Math.*, **43**(1983), pp. 1–15.
- [SD] SHOUMAN, A.R. and DONALDSON, A.B., Prediction of critical conditions for thermal explosion problems by a series method, *Combustion and Flame*, **29**(1977), pp. 213–215.
- [SD1] SHOUMAN, A.R. and DONALDSON, A.B., The stationary problem of thermal ignition in a reactive slab with unsymmetric boundary temperatures, *Combustion and Flame*, **24**(1975), pp. 203–210.
- [SDT] SHOUMAN, A.R., DONALDSON, A.B. and TSAO, H.Y., Exact solution to the one-dimensional stationary energy equation for a self-heating slab, *Combustion and Flame*, **23**(1974), pp. 17–28.
- [SE] SEMENOV, N.N., *Chemical Kinetics and Chain Reactions*, Oxford University Press, Oxford, 1935.
- [ST] STAKGOLD, T., *Green's Functions and Boundary Value Problems*, Wiley-Interscience, New York, 1979.
- [TA] TAKENO, T., Ignition criterion by thermal explosion theory, *Combustion and Flame*, **29**(1977), pp. 209–211.
- [TI] TITCHMARSH, E.C., *Eigenfunction Expansions, I*, 2nd Ed, Oxford University Press, Oxford, 1962.
- [VA] VARGA, R.S., *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, New Jersey, 1962.
- [VL] VEGA, J.M. and LIÑAN, A., Large activation energy analysis of the ignition of self-heating porous bodies, *Combustion and Flame*, **57**(1984), pp. 247–253.
- [WI] WILLIAMS, F.A., *Combustion Theory*, 2nd Ed, Benjamin Cummings, 1985.
- [WR] WAKE, G.C. and RAYNER, M.E., Variational methods for nonlinear eigenvalue problems associated with thermal ignition, *J. Differential Equations*, **13**(1973), pp. 247–256.
- [ZA] ZARAGOZA, A., *Análisis de estabilidad y respuesta transitoria de reactores catalíticos*, Tesis Doctoral, E.T.S.I. Aeronáuticos, U.P.M., Madrid, 1983.

- [ZE] ZELDOVICH, Ya.B., BARENBLATT, G.I., LIBROVICH, V.B. and MAKH-VILADZE, G.M., The Mathematical Theory of Combustion and Explosions, Plenum, 1985.
- [ZE1] ZELDOVICH, Ya.B., The theory of ignition by heated surfaces, Zh. Eksp. Fiz., **9**:1530 (1939).